

„Zur Theorie der Ausgleichsvorgänge an Pt-Elektroden und ihre mathematischen Grundlagen“

Inaugural-Dissertation
zur
Erlangung der Doktorwürde
der
Naturwissenschaftlichen Fakultät der Philipps-Universität
Marburg/Lahn

vorgelegt von

Wolfgang Grunewald
aus Stollberg/Sachsen

Marburg 1966

Fotodruck von Erich Mauersberger in Marburg

**„Zur Theorie der Ausgleichsvorgänge
an Pt-Elektroden
und ihre mathematischen Grundlagen“**

Inaugural-Dissertation
zur
Erlangung der Doktorwürde
der
Naturwissenschaftlichen Fakultät der Philipps-Universität
Marburg/Lahn

vorgelegt von

Wolfgang Grunewald

aus Stollberg/Sachsen

Marburg 1966

Fotodruck von Erich Mauersberger in Marburg



Von der Naturwissenschaftlichen Fakultät der
Philipps-Universität Marburg/Lahn als

Dissertation angenommen am... *28. 11. 1966*

Tag der mündlichen Prüfung am... *7. 12. 1966*

Berichterstatter: Prof. Dr. *H. Peyerimhoff*

Mitberichterstatter: *Prof. Dr. D. W. Lübbers*

Vorwort

Die vorliegende Arbeit zerfällt in zwei Hauptteile. Hauptteil A umfaßt die Darlegung der allgemeinen Diffusionsvorgänge und ihre praktische Bedeutung bei der Sauerstoffmessung mit der Platin-Elektrode (I) sowie die Lösungen einzelner Diffusionsprobleme mit daraus abgeleiteten Ergebnissen (II).

Hauptteil B bringt die mathematischen Grundlagen der im vorangehenden Teil genannten Probleme und die Behandlung der rein mathematischen Fragen.

Die Trennung erlaubt eine spezifische und überschaubare Darlegung sowohl der praktischen als auch der rein mathematischen Überlegungen, ohne daß der Bezug zueinander verlorengeht.

Die Ergebnisse des Hauptteils A werden an seinem Ende zusammengestellt und diskutiert. Einen Gesamtüberblick enthält die Arbeit in Form der Zusammenfassung an ihrem Schluß.

Alle mathematischen Ausdrücke sind in B fortlaufend nummeriert. Die in A aufgeführten, dem Hauptteil B entnommenen Ergebnisse tragen die gleichen Nummern wie in B. Dadurch ist der Bezug zum mathematischen Zusammenhang gewahrt. Falls in A zusätzlich zu den von B übernommenen weitere Nummerierungen erforderlich sind, werden sie durch Striche gekennzeichnet (z.B. 2,11").

<u>Vorwort</u>	
<u>Einleitung</u>	2
<u>Hauptteil A</u>	4
I Pt-ELEKTRODE - PRINZIP UND GRUNDGRÖSSEN DER pO_2 -MESSUNG.....	4
1) Prinzip der polarographischen Analyse.	4
2) Anordnung der Pt-Elektrode - Voraussetzung für eine pO_2 -Messung....	6
3) Voraussetzung für eine pO_2 -Messung in biologischen Medien - Einzugsbereich, Rühreffekt, Einstellzeit.....	8
4) Gleichzeitige Messung an verschiedenen Stellen - Mehrfachelektrode.....	11
II THEORIE DER AUSGLEICHSVORGÄNGE AN Pt-ELEKTRODEN.....	14
1) Diffusion - Diffusionsgleichung.....	14
2) Diffusionsfelder von Pt-Elektroden - Lösungen der Diffusionsgleichung.....	18
a) Pt-Elektrode mit halbkugelförmiger Oberfläche - Kugelsymmetrisches RW-Problem.....	18
α) Vorbemerkung.....	18
β) Stationäre Verhältnisse.....	18
i) Blanke Elektrode - - RW-Problem (α_1).....	20
ii) Membranbespannte Elektrode - - RW-Problem (α_2).....	23
γ) Zeitabhängige Verhältnisse.....	29
i) Blanke Elektrode - - RW-Problem (β_1).....	29
ii) Membranbespannte Elektrode - - RW-Problem (β_2).....	32
b) Pt-Elektrode mit ebener, kreisförmiger Oberfläche - Zylindersymmetrisches RW-Problem.	37
α) Vorbemerkung.....	37
β) Stationäre Verhältnisse - Blanke Elektrode.....	38
γ) Vergleich mit der halbkugelförmigen Elektrode.....	42
c) Pt-Elektrode mit ebener, quadratischer Oberfläche - RW-Problem im kartes. Koordin. System	46
α) Vorbemerkung.....	46
β) Stationäre Verhältnisse-Blanke EL	47
3) Diskussion der Ergebnisse.....	51

MATHEMATISCHE GRUNDLAGEN DER THEORIE

DER AUSGLEICHSVORGÄNGE AN Pt-ELEKTRODEN.... 56

1) Vorbemerkungen..... 56

2) Lösungen der Diffusionsgleichung..... 57

a) Kugelsymmetrisches RW-Problem..... 57

 α) Lösungsmethoden..... 58i) Transformation auf ein eindimen-
sionales Problem..... 58

ii) LAPLACETRansformation..... 58

 β) Stationäre Verhältnisse..... 60i) RW-Problem ($\alpha 1$)..... 60ii) RW-Problem ($\alpha 2$)..... 60 γ) Zeitabhängige Verhältnisse..... 61i) RW-Problem ($\beta 1$)..... 61ii) RW-Problem ($\beta 2$)..... 63

b) Zylindersymmetrisches RW-Problem..... 67

 α) Lösungsmethode..... 67 β) Stationäre Verhältnisse..... 68 γ) Vergleich mit der Lösung des
kugelsymmetrischen RW-Problems.... 70c) RW-Problem im kartesischen Koordina-
tensystem..... 72 α) Lösungsmethode..... 72i) Differentialgleichung -
Algebraisches Problem..... 72ii) Näherungslösung -
Existenz, Eindeutigkeit und Kon-
vergenz bei Verkleinerung der
Maschenweite..... 76

iii) Fehlerabschätzung..... 80

 β) Durchführung der Näherungsmethode. 85 γ) Berechnung der RW und Ausgangswerte 87 δ) Fehlerbetrachtung..... 90Zusammenfassung..... 95LiteraturverzeichnisAnhang

AO ALGOL-Programme

Lebenslauf

Einleitung

Ausgleichsvorgänge, z.B. der Ausgleich von Sauerstoffpartikeln in Gasen, Flüssigkeiten und festen Stoffen, lassen sich über den FOURIERSchen Ansatz durch eine lineare, partielle Differentialgleichung (DGL) zweiter Ordnung beschreiben. Gelingt es, diese DGL unter Berücksichtigung der Rand- und Anfangsbedingungen (RB und AB) zu integrieren, sind quantitative Aussagen über die örtliche und zeitliche Verteilung der "diffundierenden" Partikeln möglich.

Ein solcher Ausgleichsvorgang oder Diffusionsvorgang tritt bei der Sauerstoffdruckmessung (p_{O_2} -Messung) mit der Platin-Elektrode (Pt-Elektrode) auf. An der Elektrodenoberfläche werden O_2 -Moleküle reduziert. Dadurch bildet sich während des Meßvorgangs im Meßmedium eine für die Oberflächenform der Elektrode spezifische Verteilung der O_2 -Moleküle, ihr Diffusionsfeld, aus.

Für verschiedene Oberflächenformen werden die zugehörigen O_2 -Molekülverteilungen bzw. die den Molekülverteilungen entsprechenden O_2 -Partialdruckverteilungen sowie daraus abgeleitete Größen berechnet.

Nur für wenige Oberflächenformen gelingt es, die Diffusionsgleichung exakt, d.h. in zusammenhängender Form zu lösen. Alle interessierenden Fälle, für die es gelingt, werden angegeben, in der Literatur gefundene, zum Teil Wärmeleitungsprozessen analoge

Lösungen mit herangezogen. Ist eine exakte Lösung nicht möglich, bleibt nur der Weg zur approximierenden Berechnung der gesuchten Lösung. Die Differentialgleichung wird dabei durch eine ihr analoge Differenzengleichung ersetzt und diese mit Hilfe digitaler Rechenmaschinen gelöst. Das RW-Problem für die DGl ist so auf ein algebraisches Problem zurückgeführt.

Für den Fall einer ebenen, quadratischen Elektrodenoberfläche wird eine von der Diskretisierung abhängende Näherungslösung der stationären Diffusionsgleichung, der LAPLACEschen DGl, für drei unabhängige Variable berechnet. Die angegebene Fehlerabschätzung erfordert weder die Kenntnis der exakten Lösung, noch irgendeiner ihrer Ableitungen. - Vom mathematischen Standpunkt aus liegt das Schwergewicht auf der Behandlung dieses Falles.

Durchgeführt wurden die numerischen Berechnungen hauptsächlich auf der IBM 7094 des DEUTSCHEN RECHENZENTRUMS in DARMSTADT mit dankenswerter Unterstützung der DEUTSCHEN FORSCHUNGSGEMEINSCHAFT. Zusätzlich berechnete die TR 4 und die Z22 der ZENTRALEN RECHENANLAGE sowie die PDP-8 des INSTITUTS für ANGEWANDTE PHYSIOLOGIE an der PHILIPPS-UNIVERSITÄT MARBURG Teile des Problems.

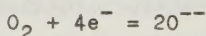
Besonderen Dank schulde ich meinen verehrten Lehrern, Prof. Dr. A. PEYERIMHOFF und Prof. Dr. D. W. LÜBBERS, für ihre großzügige Unterstützung dieser Arbeit.

Hauptteil A

I Pt-ELEKTRODE - PRINZIP UND GRUNDGRÖSSEN DER pO_2 -MESSUNG

1) Prinzip der polarographischen Analyse

Der Grundvorgang bei der pO_2 -Messung mit der Pt-Elektrode ist eine polarographische Analyse [32]. Pt-Elektrode und ihre Bezugselektrode sind von einem Elektrolyt umgeben. Bei Anlegen einer gegen die Bezugselektrode negativen Spannung an die Pt-Elektrode findet eine elektrochemische Reduktion statt, sobald O_2 an die Pt-Oberfläche gelangt:



Der dadurch im Messkreis (Abb.1) entstehende elektrische Strom bildet das Meßsignal der pO_2 -Bestimmung.

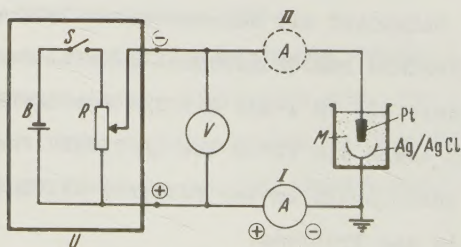


Abb.1. Meßkreis zur polarographischen Messung des Sauerstoffdruckes. Mit der Spannungsquelle U wird die Polarisationsspannung V erzeugt, die an dem Widerstand R abgegriffen werden kann. Di Polarisationsspannung wird an die polarographische Meßzelle (M) gelegt, welche aus Platinelektrode (Pt), Elektrolyt und Bezugselektrode (Ag/Ag Cl) besteht. Den jeweils fließenden Strom zeigt das Instrument A an, das sich entweder bei I oder II befindet. In Stellung I läßt sich der eine Pol von Instrument A erden. A Strommeßgerät (Empfindlichkeit ca. $1 \cdot 10^{-9}$ A/Skt); B Batterie; M polarographische Meßzelle; R Spannungsteiler (ca. 1 Kilo-Ohm); S Schalter; U Spannungsquelle (ca. 0 bis 1 Volt); V Spannungsmeßgerät

Abb.1: Aus [29] übernommen.

Die Pt-Elektrode verbraucht während der Messung ständig O_2 . Der dadurch verursachte Niveauunterschied in der O_2 -Molekülverteilung und der damit zusammenhängenden pO_2 -Verteilung im Messmedium versucht sich auszugleichen. Es entsteht ein Partikelfluß zur Pt-Elektrode hin. Er steigt mit zunehmender Spannung, bis sämtliche O_2 -Moleküle, die an die Elektrodenoberfläche gelangen, sofort reduziert werden. Die Anzahl der O_2 -Moleküle und somit der pO_2 an der Pt-Oberfläche ist dann gleich Null. Von diesem Spannungswert an bleibt in einem gewissen Spannungsintervall, der sogenannten Polarisationsstufe (Abb.2), der O_2 -Partikelfluß zur Elektrodenoberfläche praktisch von der angelegten Spannung unabhängig.

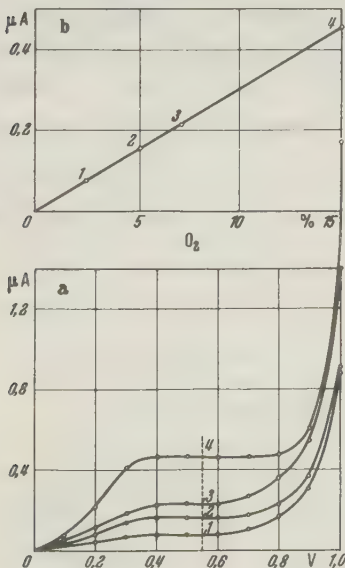


Abb. 2. pO_2 -Messung. a Polarogramme bei verschiedenem O_2 -Gehalt (2,5—15,04%). b Darstellung der Eichkurve aus dem bei 550 mV (Sauerstoffstufe) abgelesenen Stromwerten. (Temp. = 37°C). Im Bereich der Stufe ist der Stromzuwachs pro 100 mV für 1: 2 nA/100 mV; für 4: 0 nA/100 mV

Der Reduktionsstrom, also das Meßsignal, wird ausschließlich von der Menge der O_2 -Moleküle bestimmt, die zur Oberfläche der Pt-Elektrode gelangt. Damit ist noch kein unmittelbarer Bezug zwischen Meßsignal und O_2 -Partialdruck des Meßmediums nachgewiesen. In jedem Fall bildet der Fluß der O_2 -Moleküle zur Elektrodenoberfläche die Grundgröße der Messung. Erst gewisse zusätzliche Überlegungen machen die Relation zwischen Meßsignal und pO_2 des Meßmediums evident. Dazu sind einige Bemerkungen zur Konstruktion der Pt-Elektrode nötig.

2) Anordnung der Pt-Elektrode - Voraussetzung für eine pO_2 -Messung

Abb.3 zeigt den Gesamtaufbau, Abb.4 den Meßkopf der Pt-Elektrode nach GLEICHMANN und LÜBBERS [29], eine Weiterführung der CLARK-Elektrode [13].

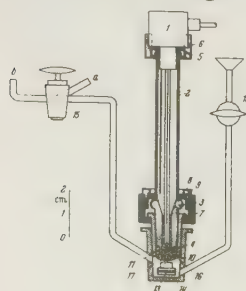


Abb. 3

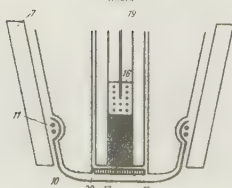


Abb. 4

Abb. 3, pO_2 -Elektrode mit Analysen- und Pt-Elektrode (als Elektrode), 2 Elektrolytlösung mit 1 M-Wasser und 4 M-HCl (zur Aufnahme des Membran-Isotop-Jodens), 3 Membran (Kunststoff, Pt-Elektrode zur Messung), 6 Schmelzleitung (Kunststoff), 7 Schmelzleitung (Schmelzleitung (Glas-Schmelzleitung), 8 Sprünger, 10 Membran, 11 Elektrolytlösung, 12 Manometer (Abb. 4), 13 Elektrode, 14 Analysen- und Pt-Elektrode, 15 Membran, 16 Membran, 17 Elektrolytbehälter, 18 Elektrolytbehälter, 19 Elektrolytbehälter.

Abb. 4, Meßkopf der stahlisolierten Quarzglas-Platinelektrode. Der Pt-Elektrode 1,5 mm - (17) ist die Gaszufuhr (16) mit dem Ablesedraht (17) verbunden. Zwischen der blankpolierten Pt-Oberfläche und der Membran (10) befindet sich ein 12 µ dicker (Elektrolytbehälter (11), Membrananordnung mit Gaszufuhr (12) und Schmelzleitung (7), (18) Elektrolytbehälter mit G.K.)

Abb.3 und Abb.4: Aus [29] übernommen.

Die Reduktion der O_2 -Moleküle findet hinter einer O_2 -durchlässigen Membran statt. Einmal ist dadurch garantiert, daß die Reduktion stets im gleichen Medium, also unabhängig von den Eigenschaften des Meßmediums abläuft; zum anderen schafft die Membran einen definierten Abstand zwischen Pt-Oberfläche und Meßmedium. Durch Rühren des Meßmediums während der Messung ist es möglich, an der Grenzfläche Membran/Meßmedium den gleichen pO_2 wie im restlichen Medium aufrechtzuhalten. Da an der Grenzfläche Membran/Platin alle O_2 -Partikel sofort bei ihrer Ankunft reduziert werden, stammt der das Meßsignal bestimmende Partikelfluß ausschließlich aus der Membran. Der Fluß der O_2 -Moleküle ist in erster Näherung der Differenz der Partialdrucke an den Membrangrenzflächen proportional (FICKsches Gesetz). An der Pt-Oberfläche ist der pO_2 Null; folglich ist der Partikelfluß und damit der Meßstrom dem pO_2 des Meßmediums proportional. Die Proportionalitätskonstante ist über eine Eichkurve (vgl. Abb.2) bestimmbar. Für eine pO_2 -Messung sind somit drei Faktoren von wesentlicher Bedeutung:

1. ein definierter pO_2 an der Pt-Oberfläche
2. ein definierter Abstand zwischen Pt-Oberfläche und Meßmedium
3. eine genügende Turbulenz im Meßmedium, um überall den zu messenden pO_2 aufrechtzuhalten.

Das Gehäuse der Pt-Elektrode muß zudem aus einer Substanz bestehen, die eine gegenüber der Membran vernachlässigbare O_2 -Aufnahmefähigkeit besitzt. Daher ersetzten GLEICHMANN und LÜBBERS das Plexiglasgehäuse der CLARK-Elektrode durch ein Glasgehäuse [29]. Das in Abb.4 eingezeichnete Cellophanblättchen ist aus Stabilitätsgründen eingefügt.

3) Voraussetzung für eine pO_2 -Messung in biologischen Medien -
Einzugsbereich, Einstellzeit und Rühreffekt

Den Überlegungen des vorangehenden Abschnitts lag stillschweigend die Voraussetzung zugrunde, das Meßmedium sei rührbar. In biologischen Medien, z.B. dem Gewebe, ist das nicht der Fall. Von den drei Voraussetzungen für eine pO_2 -Bestimmung sind nur die beiden erstgenannten erfüllt. Der das Meßsignal bestimmende O_2 -Partikelfluß bleibt nicht mehr auf die Membran allein beschränkt. Er erstreckt sich in einem nichtrührbaren Medium auch auf das Medium selbst. An der Grenzfläche Membran/Medium herrscht ein pO_2 , der kleiner ist als der wahre, zu bestimmende pO_2 . Der Unterschied zwischen dem gemessenen und dem wahren pO_2 des Mediums ist umso kleiner, je mehr sich der Partikelfluß auf die Membran allein beschränkt, je kleiner also der "Bereich" ist, aus dem die O_2 -reduzierende Pt-Oberfläche ihren O_2 "bezieht". Dieser von der Oberflächenform der Pt-Elektrode abhängende Bereich heißt

"Einzugsbereich". Streng genommen entnimmt die Pt-Elektrode dem gesamten Meßmedium O_2 . Da aber die pro Volumenelement entnommene O_2 -Menge mit wachsender Entfernung von der Elektrodenoberfläche asymptotisch kleiner wird, definiert man als Grenze des Einzugsbereiches die Menge aller der Punkte, an denen sich ein pO_2 einstellt, der 90% (bzw. 95%) des wahren pO_2 beträgt.

Ist der Einzugsbereich einer Elektrode klein, wirken sich Störungen wie Konvektion oder Strukturunterschiede des Mediums in der Nähe der Meßstelle geringer auf das Meßergebnis aus als bei großem Einzugsbereich. Für eine pO_2 -Messung in biologischen Medien leitet sich daraus als dritte Voraussetzung ab:

ein kleiner Einzugsbereich der Elektrode.

Diese Voraussetzung kann auf zwei Wegen erfüllt werden. Einmal können Form und Größe der Elektrodenoberfläche den Einzugsbereich klein halten. Zum anderen können ihn geeignete Dicke und Membraneigenschaft weitgehend auf die Membran beschränken. Beispielsweise sorgt eine schlechtere Leitfähigkeit der Membran für O_2 gegenüber der des Mediums dafür, daß sich die O_2 -Partikel vor der Membran gewissermaßen stauen und so der gewünschte Effekt erzielt wird.

Geringe Leitfähigkeit der Membran für O_2 wirkt sich andererseits auch negativ aus. Bei Messungen in biologischen Medien treten häufig pO_2 -Veränderungen auf. Oft sind es gerade diese, die besonders interessieren. Um eine zeitliche pO_2 -Veränderung mit der Pt-Elektrode zu erfassen, muß sie schnell genug reagieren können, d.h. schneller als die pO_2 -Änderung abläuft. Eine kleine Leitfähigkeit der Membran bedeutet aber eine große "Einstellzeit" der Elektrode.

Definieren läßt sich die Einstellzeit einer Elektrode ebenso schlecht wie ihr Einzugsbereich. Es wird daher als Einstellzeit die Zeit bezeichnet, die die Elektrode benötigt, um bei einer sprunghaften pO_2 -Änderung 90% (bzw. 95%) des neuen pO_2 -Wertes anzugeben.

Da einerseits der Einzugsbereich klein, andererseits die Einstellzeit kurz sein sollen, ist hier ein Kompromiß erforderlich.

Die Größe des Einzugsbereiches ist in der Praxis nur sehr schlecht zu kontrollieren. Daher tritt hier - zumindest für rührbare Medien - eine andere charakteristische Größe, der sogenannte "Rühreffekt" an seine Stelle. Er gibt den Unterschied zwischen dem gemessenen und dem wahren pO_2 des ungerührten Mediums an, also die Differenz zwi-

schen den pO_2 -Werten an der Grenzfläche Membran/
Medium bei gerührtem und ungerührtem Medium. Ist

p_g der pO_2 an der Grenzfläche Membran/Medium
bei gerührtem Medium,

p_u der pO_2 an der Grenzfläche Membran/Medium
bei ungerührtem Medium,

so ist ganz allgemein

$$R = \frac{p_g - p_u}{p_g} \cdot 100\% = \left(1 - \frac{p_u}{p_g}\right) \cdot 100\%$$

der Rühreffekt einer Pt-Elektrode.

Ein kleiner Rühreffekt besagt wie ein kleiner
Einzugsbereich, daß sich der Hauptteil des O_2 -
Partikelflusses auf die Membran beschränkt und
Störungen aus der Nähe der Meßstelle das Meßer-
gebnis wenig beeinflussen.

Als Voraussetzung für eine pO_2 -Messung in biolo-
gischen Medien ergeben sich folglich:

1. ein definierter pO_2 an der Pt-Oberfläche
2. ein definierter Abstand zwischen Pt-Ober-
fläche und Meßmedium
3. ein kleiner Einzugsbereich (äquivalent dazu
ein kleiner Rühreffekt) unter Berücksich-
tigung der erforderlichen Einstellzeit.

- 4) Gleichzeitige Messung an verschiedenen
Stellen - Mehrfachelektrode

Biologische Medien zeigen nicht nur zeitliche
Schwankungen ihres O_2 -Partialdruckes. Auch von
Ort zu Ort treten pO_2 -Unterschiede auf. Um eine

ortsabhängige pO_2 -Verteilung zu messen, kann die Einzelelektrode durch die Mehrfachelektrode nach LÜBBERS ersetzt werden. Jeder einzelne Pt-Draht dieser Elektrode mißt für sich getrennt den pO_2 nach dem beschriebenen Prinzip und hat als Elektrode seinen Einzugsbereich. Damit die einzelnen Meßsignale unabhängig voneinander sind, dürfen sich während der Messung die einzelnen Elektroden nicht gegenseitig beeinflussen. In der Mehrfachelektrode müssen die Pt-Drähte daher einen Abstand voneinander haben, so daß sich ihre Einzugsbereiche nicht überlappen. Andererseits soll der pO_2 an möglichst eng benachbarten Punkten gemessen werden. Dies führt zu einem effektiven Abstand der Einzeldrähte. Was über Rühreffekt und Einstellzeit gesagt ist, läßt sich unmittelbar auf jeden Pt-Draht der Mehrfachelektrode übertragen.

Für eine pO_2 -Messung in biologischen Medien mit einer Mehrfachelektrode tritt neben die im letzten Abschnitt genannten Voraussetzungen die eines effektiven Abstandes der messenden Pt-Drähte.

Bei pO_2 -Messungen in rührbaren Medien bewirkt die Mehrfachelektrode eine Vergrößerung des Meßsignales, ohne Rühreffekt und Einstellzeit ungünstig zu beeinflussen.

Falls im Text nicht ausdrücklich von der Mehr-
fachelektrode gesprochen wird, ist mit "Elektrode"
stets die Einzelelektrode gemeint.

II THEORIE DER AUSGLEICHSVORGÄNGE AN Pt-ELEKTRODEN

1) Diffusion und Diffusionsgleichung

Wurden im ersten Kapitel die Probleme mehr phänomenologisch behandelt, so wird dieses Kapitel ihre quantitative Fassung auf der Basis der Diffusionsgesetze bringen.

Ausgleichsvorgänge können verschiedener Natur sein. So werden

bei Wärmeleitung Temperaturdifferenzen,
bei Flüssigkeitsreibung Impulsdifferenzen,
bei Elektrizitätsleitung Spannungsdifferenzen

ausgeglichen. Alle diese Prozesse beschreibt für isotrope Medien der FOURIERSche Ansatz [53], [19] (1822)

$$\vec{v} = - D \text{ grad } u.$$

Diesen Ansatz übertrug der WÜRZBURGER Physiologe A.FICK [19] (1855) auf die Diffusion, den Ausgleich materieller Dichtedifferenzen. Danach bedeuten:

$\vec{v} \left[\frac{\text{ml}}{\text{cm}^2 \cdot \text{sec}} \right]$ materieller Fluß, auch Stromdichtevektor, d.h. die Materiemenge, die pro Zeiteinheit durch eine senkrecht zu $\vec{v}$ gelegte Einheitsfläche hindurchtritt.

$D \left[\frac{\text{cm}^2}{\text{sec}} \right]$ Diffusionskoeffizient

$u \left[\frac{\text{ml}}{\text{cm}^3} \right]$ Konzentration des im Diffusionsmedium gelösten Stoffes.

Allgemein ist es üblich, für u die Konzentration der im Diffusionsmedium gelösten Materie anzugeben. Dann ist u aber keine vom Diffusionsmedium unab-

hängige Größe. Sie hängt ab vom Löslichkeitsvermögen des Mediums für die diffundierende Materie, also von einer für das Diffusionsmedium spezifischen Stoffkonstanten. Berücksichtigt man das HENRY-DALTONsche Gesetz

$$u = \alpha \cdot p,$$

mit

$$u \left[\frac{\text{ml}}{\text{cm}^3} \right] \quad \text{Bedeutung wie oben,}$$

$$\alpha \left[\frac{\text{ml}}{\text{cm}^3} \right] \frac{1}{[\text{Torr}]} \quad \text{BUNSENScher Löslichkeitskoeffizient}$$

$$p [\text{Torr}] \quad \text{Partialdruck (Aktive Größe der Diffus.),}$$

ergibt sich

$$\vec{v} = - D \alpha \text{ grad } p.$$

Damit sind in $K = \alpha \cdot D$ die spezifischen Konstanten zusammengefaßt; p ist von ihnen unabhängig. K hat die Dimension $\left[\frac{\text{ml}}{\text{cm sec Torr}} \right]$ und heißt in Analogie zur Wärmeleitfähigkeit "Diffusionsleitfähigkeit" [57]. Allgemein lautet dann der FOURIERSche Ansatz für die Diffusion:

Der Materiefluß findet in Richtung des Partialdruckgefälles statt und ist der Stärke dieses Gefälles proportional

$$\vec{v} = - K \text{ grad } p. \quad (1,0)$$

Bei der p_{O_2} -Messung mit der Pt-Elektrode bildet sich mit Meßbeginn vom Meßmedium zur Elektrodenoberfläche ein Partialdruckgefälle oder auch "Druckgradient" aus. Diesem Druckgradienten folgen die O_2 -Moleküle.

Für die Diffusionsverhältnisse an der Pt-Elektrode gilt Gleichung (1,0), speziell mit

$\vec{v}$ Fluß der O_2 -Moleküle

K Diffusionsleitfähigkeit der Membran bzw.
des Meßmediums für O_2

p O_2 -Partialdruck (pO_2).

Der Diffusionsansatz (1,0) erlaubt zwar, die Vorgänge an der Pt-Elektrode zu beschreiben, jedoch über die pO_2 -Verteilung im Diffusionsfeld und alle daraus abgeleiteten Fragen sagt er nichts aus.

Dies erlaubt erst die Lösung der partiellen DGl, der Diffusionsgleichung,

$$D \Delta p = \frac{\partial p}{\partial t}, \quad (1,1)$$

die sich aus (1,0) mit Hilfe der Kontinuitätsgleichung und des GAUSSschen Satzes ableiten läßt [27] .

Δ ist der LAPLACEoperator.

Die DGl (1,1) beschreibt Diffusionsprozesse, in denen sich p zeitlich und räumlich ändert. Ist p hingegen zeitlich konstant, so verschwindet die rechte Seite in (1,1) identisch. (1,1) geht in die LAPLACEsche DGl

$$\Delta p = 0 \quad (1,1')$$

über und stellt die Diffusionsgleichung für stationäre Prozesse dar. Es handelt sich dabei um Gleichgewichtszustände (sog. Fließgleichgewichte), die sich als Endphase zeitabhängiger Diffusionsprozesse einstellen.

Zur Lösung der Diffusionsgleichung sind gewisse Nebenbedingungen erforderlich, die Randbedingungen (RB) für stationäre, die Rand- und Anfangsbedingungen (RB und AB) für zeitabhängige Vorgänge. Durch sie ist festgelegt, welches Verhalten die gesuchte Lösung auf dem Rand des Diffusionsraumes annimmt und welche Druckverhältnisse zu Meßbeginn in Membran und Meßmedium herrschen. Einzelheiten dazu sind von Fall zu Fall zu klären. Grundsätzlich liegen jedoch stets zwei RB fest:

1. $p = 0$ an der Elektrodenoberfläche
2. $p = p_c = \text{const.}$ in großer Entfernung von der Elektrodenoberfläche.

RB 2 beinhaltet die Voraussetzung, daß in großer Entfernung von der Meßstelle der wahre pO_2 des Mediums auch während der Messung aufrechterhalten wird. Bis dahin bildet sich der das Meßsignal verursachende Druckgradient aus.

Nicht für jede Oberflächenform der Pt-Elektrode können die DGL (1,1) und (1,1') integriert und die Lösung in geschlossener Form angegeben werden. Vielfach ist nur eine näherungsweise Berechnung der das Diffusionsfeld beschreibenden, gesuchten Lösung möglich.

2) Diffusionsfelder von Pt-Elektroden- Lösungen der Diffusionsgleichung

a) Pt-Elektrode mit halbkugelförmiger Oberfl.- Kugelsymmetrisches RW-Problem

α) Vorbemerkung

In der Praxis hat sich die Pt-Elektrode mit halbkugelförmiger Oberfläche als wenig brauchbar erwiesen. Trotzdem sprechen folgende Gründe dafür, sie an erster Stelle zu behandeln. Einmal lassen sich an ihr alle interessierenden Fragen besprechen. Die Ergebnisse der Berechnung sind wegen der auftretenden Kugelsymmetrie weitgehend überschaubar. Zum anderen können anders gestaltete Elektrodenoberflächen durch eine halbkugelförmige ersetzt werden. Dadurch sind näherungsweise Aussagen über ihre Diffusionsfelder möglich.

β) Stationäre Verhältnisse

Die Diffusionsgleichung nimmt unter Ausnutzung der Kugelsymmetrie der Elektrodenoberfläche die Gestalt

$$D \left(\frac{\partial^2 p}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial p}{\partial r} \right) = \frac{\partial p}{\partial t} \quad (2,0)$$

an. Bei stationären Bedingungen gilt

$$\frac{\partial^2 p}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial p}{\partial r} = 0 \quad (2,0')$$

Wie auch die Lösungen im einzelnen aussehen mögen, stets herrscht auf konzentrischen Kugelschalen (Isobarenflächen) um die Elektrodenoberfläche herum überall der gleiche Druck. Senkrecht dazu verläuft der Fluß der O_2 -Partikel zur Elektrode (Abb.5)(*.

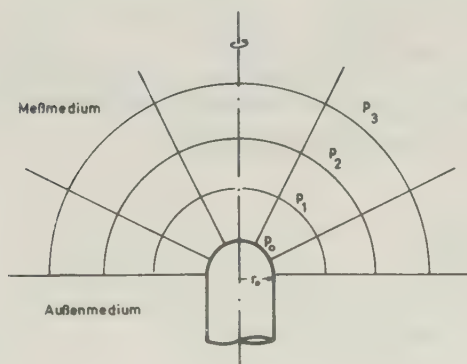


Abb.5: Isobaren ($p_0 \dots p_3$) und Flußlinien im Diffusionsfeld einer blanken Pt-Elektrode mit halbkugelförmiger Oberfläche (Radius r_0).

(* Alle Lösungen haben die Eigenschaft, im unteren Halbraum spiegelsymmetrisch zum oberen Halbraum zu verlaufen. Es interessiert hier wie für alle späteren Probleme nur der jeweilige Verlauf im oberen Halbraum.

Senkrecht zur Symmetrieebene ist außerhalb der Elektrodenoberfläche stets

$$\text{grad } p = 0.$$

Dadurch wird der Voraussetzung entsprochen, daß kein O_2 über die Grenze Meßmedium/Außenmedium abdiffundiert.

1) Blanke Elektrode -
- RW-Problem ($\propto 1$)

Grundsätzlich kann man eine pO_2 -Messung mit einer blanken Elektrodenoberfläche, d.h. ohne Membran, durchführen. Derartige Elektroden waren die Vorläufer [42] der membranbespannten. Der pO_2 -Verlauf im Diffusionsfeld einer solchen Elektrode wird über die DGl (2,0') durch

$$p(r) = p_c \left(1 - \frac{r_0}{r}\right) \quad (2,11)$$

beschrieben; r_0 ist der Elektrodenradius, p_c der wahre pO_2 des Meßmediums (Abb.6).

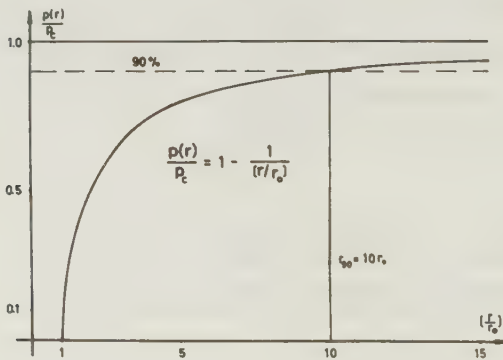


Abb.6: pO_2 -Verlauf im Diffusionsfeld einer blanken Elektrode mit halbkugelförmiger Oberfläche (Radius r_0); r_{90} gibt die Entfernung von der Oberfläche an, in der der pO_2 auf 90% des wahren pO_2 ($=p_c$) angestiegen ist, also die Grenze des Einzugsbereiches.

Der Einzugsbereich ist unmittelbar abzulesen. Er wird durch die Kugelschale mit dem Radius $r_{90}=10r_0$ begrenzt.

Der Stromdichtevektor $\vec{v}$ ergibt sich nach (1,0) zu

$$\vec{v} = -K \frac{r_0 p_c}{r^2}.$$

Speziell an der Elektrodenoberfläche ist er

$$\vec{v}_0 = -K \frac{p_c}{r_0}.$$

Der Betrag des relativen Stromdichtevektors v/v_0 ist damit

$$\frac{v}{v_0} = \frac{1}{[r/r_0]^2}.$$

Der Fluß der O_2 -Partikel durch die Einheitsfläche der Kugelschale mit dem Radius r_{90} ist danach auf 1% des Flusses durch die Elektrodenoberfläche abgefallen. Der Fluß durch die Einheitsfläche nimmt mit wachsendem Abstand von der Pt-Oberfläche um eine Potenz schneller ab als der Partialdruck (vgl. Abb.6 u. 7).

Als Gesamtfluß errechnet sich

$$\vec{V} = -2\pi K p_c r_0.$$

Er ist durch alle Isobarenflächen gleich groß. Proportional zum Elektrodenradius wächst er an und verringert sich mit kleiner werdender Diffusionsleitfähigkeit des Meßmediums für O_2 .

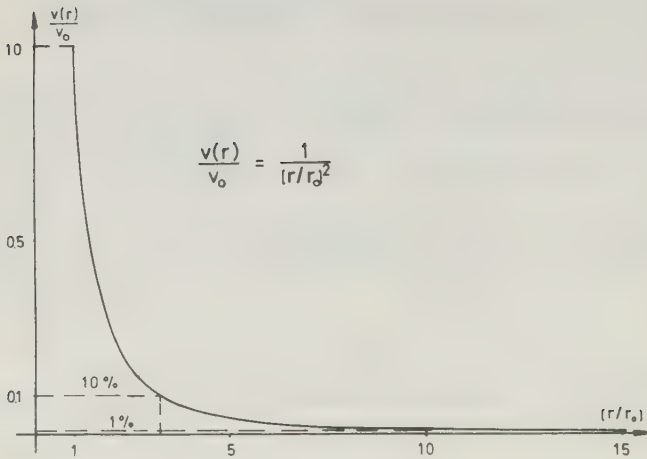


Abb.7: Relative Stromdichte im Diffusionsfeld einer blanken Elektrode mit halbkugelförmiger Oberfläche; v_0 ist die Stromdichte an der Elektrodenoberfläche. Bei $r=10r_0$ ist die Stromdichte auf 1% ihres Wertes bei $r=r_0$ abgesunken.

In rührbaren Medien erzeugten LÜBBERS und OCKENGA mit einem Magnetrührer unmittelbar vor der Pt-Oberfläche eine Turbulenz, so daß nur die "ziemlich stabile, an der benetzbaren Elektrodenoberfläche anhaftende, dünne Schicht für die O_2 -Diffusion maßgeblich blieb" [29,S.435] . Nach den von ihnen angegebenen Rühreffekten läßt sich nachträglich die Diffusionsschichtdicke d berechnen. Dazu sind vorerst noch einige Überlegungen erforderlich.

ii) Membranbespannte Elektrode -
- RW-Problem ($\propto 2$)

Die halbkugelförmige Elektrodenoberfläche sei mit einer Membran der Dicke d und der Diffusionsleitfähigkeit K_1 überzogen. Das Meßmedium sei rührbar, seine Diffusionsleitfähigkeit K_2 (Abb.8).

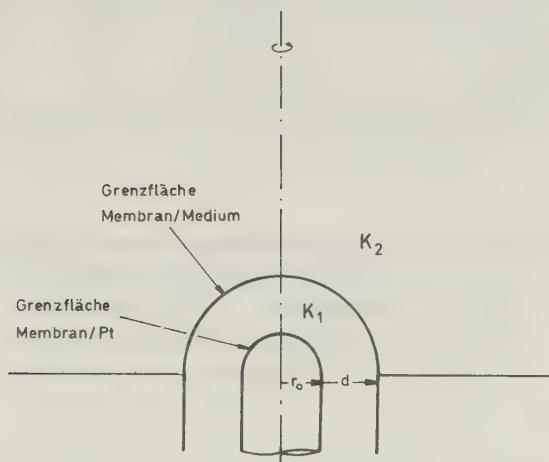


Abb.8: Membranbespannte Pt-Elektrode mit halbkugelförmiger Oberfläche;
 d, K_1 sind Dicke und Diffusionsleitfähigkeit der Membran,
 K_2 die Diffusionsleitfähigkeit des Mediums.

Bei genügender Turbulenz herrscht im Medium überall der gleiche Druck p_c . Das Diffusionsfeld beschränkt sich nur auf die Membran, sein pO_2 -Verlauf wird durch

$$p(r) = p_c \frac{r_0 + d}{d} \left(1 - \frac{r}{r_0}\right) \quad (2,12)$$

beschrieben.

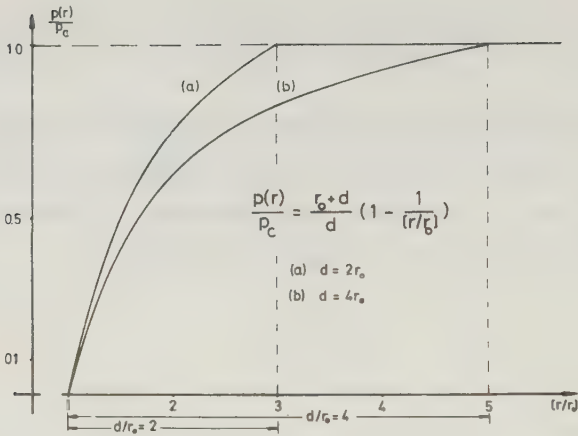


Abb.9a: pO_2 -Verlauf in der Membran einer Pt-Elektrode mit halbkugelförmiger Oberfläche bei gerührtem Meßmedium. Es sind $d=2r_0$ und $d=4r_0$ die Membrandicken für die Kurven (a) bzw. (b). Im Meßmedium herrscht überall der $pO_2=p_c$.

Als Gesamtfluß und somit Fluß durch die Elektrodenoberfläche ergibt sich dem Betrage nach

$$V = 2\pi K_1 p_c \left(\frac{r}{d} + 1 \right) r_0 .$$

Er hängt neben dem Elektrodenradius von der Schichtdicke der Membran und ihrer Diffusionsleitfähigkeit ab, jedoch nicht von der des Mediums.

Kann im Medium keine Turbulenz erzeugt werden, dehnt sich das Diffusionsfeld über die Membran hinaus auch auf das Medium aus.

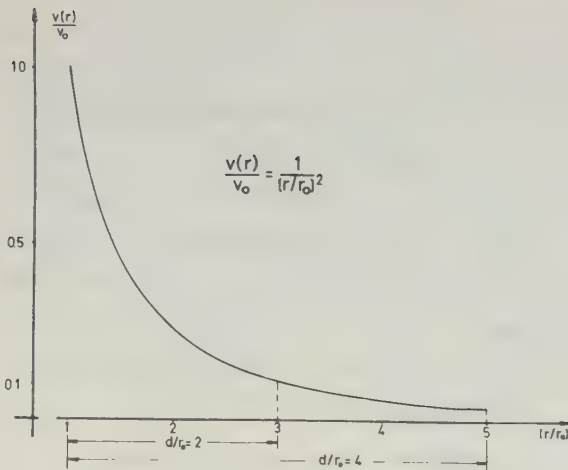


Abb.9b: Relative Stromdichte der unter 9a genannten Elektrode für eine Membrandicke von $d=2r_0$ und $d=4r_0$. Der Wert von v/v_0 an der Grenzfläche Membran/Medium ($r=r_0+d$) gibt an, welche Stromdichte durch Rühren des Mediums an dieser Stelle aufrechterhalten werden muß, damit sich das Diffusionsfeld nicht über die Membran hinaus erstreckt.

Sein Verlauf wird durch

$$p(r) = \begin{cases} p_c \frac{r_0 + d}{d} \frac{\sigma}{1 + \sigma} \left(1 - \frac{r}{r_0}\right) & \text{in } r_0 \leq r \leq r_0 + d \text{ (Membran)} \\ p_c \left(1 - \frac{1}{1 + \sigma} \frac{r_0 + d}{r}\right) & \text{in } r \geq r_0 + d \text{ (Medium)} \end{cases} \quad (2,13)$$

mit $\sigma = \frac{K_1}{K_2} \frac{d}{r_0}$ beschrieben. Hierfür wurde vorausgesetzt, daß die O_2 -Partikel ohne Hindernis die Grenzfläche Membran/Medium passieren können.

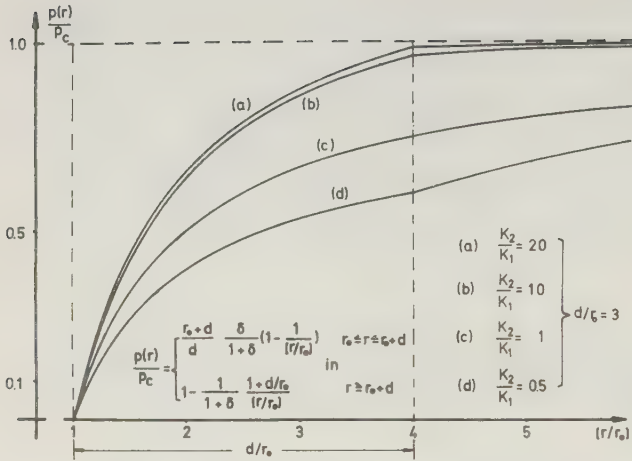


Abb.10: pO_2 -Verlauf im Diffusionsfeld einer membranbespannten Elektrode mit halbkugelförmiger Oberfläche bei ungerührtem Meßmedium. Im Gegensatz zu Abb.9a erstreckt sich hier das Diffusionsfeld auf Membran und Meßmedium. Das Verhältnis der Diffusionsleitfähigkeiten von Membran und Medium (K_2/K_1) ist der Parameter in den Kurven (a) bis (d); die Membrandicke beträgt $d=3r_0$. An der Grenzfläche Membran/Medium ($r=r_0+d$) ist unmittelbar der Rühreffekt abzulesen. Er wird durch die Differenz zwischen 1 und dem Funktionswert an dieser Stelle angegeben.

Speziell errechnet sich ein pO_2 an der Grenzfläche Membran/Medium zu

$$p(r_0+d) = p_c \frac{\delta}{1+\delta} = p_c \frac{1}{1 + \frac{r_0}{K_2/K_1 \cdot d}} \quad (2,13')$$

Der p_{O_2} wird an dieser Stelle größer, wenn das Verhältnis der Diffusionsleitfähigkeiten K_2/K_1 wächst, wenn also die Membran den O_2 schlechter durchläßt als das Medium ($K_2 > K_1$). Ebenso wirkt sich eine Vergrößerung von d aus. Bei der Berechnung des Rühreffekts wird auf den Druck an dieser Stelle zurückgegriffen. Der das Meßsignal bestimmende Fluß durch die Pt-Oberfläche ist dem Betrage nach

$$V = 2\pi p_c K_1 K_2 \frac{r_o(r+d)}{K_2 d + K_1 r_o} = 2\pi p_c K_2 \frac{r_o + d}{1 + \sigma}.$$

Beide Diffusionsleitfähigkeiten, K_1 wie K_2 , bestimmen das Meßsignal. Verkleinert man K_1 , wie oben erwähnt, verkleinert sich ebenso der Fluß durch die Pt-Oberfläche und damit das Meßsignal.

Die relative Stromdichte zeigt den gleichen Verlauf wie Abb.9b.

Der Rühreffekt ist laut Definition

$$R = (1 - \frac{p_u}{p_g}) \cdot 100\%.$$

Mit $p_g = p_c$ und $p_u = p(r_o + d)$ gemäß (2,13') ergibt sich daraus für die membranbespannte Pt-Elektrode mit halbkugelförmiger Oberfläche ein Rühreffekt von

$$R = \frac{1}{1 + \sigma} \cdot 100\% \text{ mit } \sigma = \frac{K_2}{K_1} \frac{d}{r_o}. \quad (2,13'')$$

Er verkleinert sich mit wachsendem σ . Ein kleiner Rühreffekt läßt sich danach erreichen, indem

1. das Verhältnis der Diffusionsleitfähigkeiten K_2/K_1 (Medium/Membran) groß,
2. die Membrandicke d groß,
3. der Elektrodenradius r_0 klein

gehalten werden. Tabelle II auf Seite 55 zeigt R in Abhängigkeit von d .

Ist $K_1=K_2$, ergibt sich aus (2,13") der Rühreffekt für ein einheitliches Medium:

$$R = \frac{1}{1+d/r_0} \cdot 100\% ;$$

d gibt die Schichtdicke an, auf die sich bei vorhandener Turbulenz das Diffusionsfeld beschränkt. Das aber ist gerade die früher (vgl. S.22) erwähnte Diffusionsschichtdicke einer unmittelbar an der Pt-Oberfläche gerührten, blanken Elektrode. Sie errechnet sich bei bekanntem Rühreffekt R (in %) zu

$$d = r_0 \left(\frac{1}{R/100\%} - 1 \right).$$

Tabelle I zeigt die Diffusionsschichtdicke in Abhängigkeit vom Rühreffekt.

Tab.I:

d	R in %	d	R in %
$1/4r_0$	80	$4r_0$	20
$2/3r_0$	60	$9r_0$	10
r_0	50	$19r_0$	5
$3/2r_0$	40	$99r_0$	1
$3r_0$	25	$199r_0$	0.5

g) Zeitabhängige Verhältnisse

Alle bisherigen Ergebnisse über die Diffusionsverhältnisse an halbkugelförmigen Pt-Elektroden gelten erst nach einer vom Meßbeginn an hinreichend langen Zeit. Die zeitlichen Veränderungen im Diffusionsfeld müssen abgeklungen sein. Interessieren dagegen die zeitlich veränderlichen Zustände unmittelbar nach Meßbeginn, ist die DGL (1,1) in der Gestalt (2,0) zu lösen.

Auch die zeitlich veränderlichen Diffusionsfelder haben die Eigenschaft, daß auf konzentrischen Kugelschalen zur Elektrodenoberfläche (Isobarenflächen) gleicher Druck herrscht. Dieser ändert sich jetzt zeitlich.

1) Blanke Elektrode - - RW-Problem (31)

Das Medium ruhe. Vor Meßbeginn, also zur Zeit $t=0$, herrsche in ihm der Druck $p=p_c$. Die Druckverteilung im Diffusionsfeld nach Meßbeginn ($t > 0$) beschreibt die Lösung

$$p(r,t) = p_c \left(1 - \frac{r}{r_0}\right) + p_{cr} \frac{r}{r_0} \operatorname{erf}\left(\frac{r-r_0}{2\sqrt{Dt}}\right) \quad (2,15)$$

Für wachsendes t strebt (2,15) der stationären p_{O_2} -Verteilung gemäß (2,11) zu. Der zweite Summand in (2,15) wird Null.

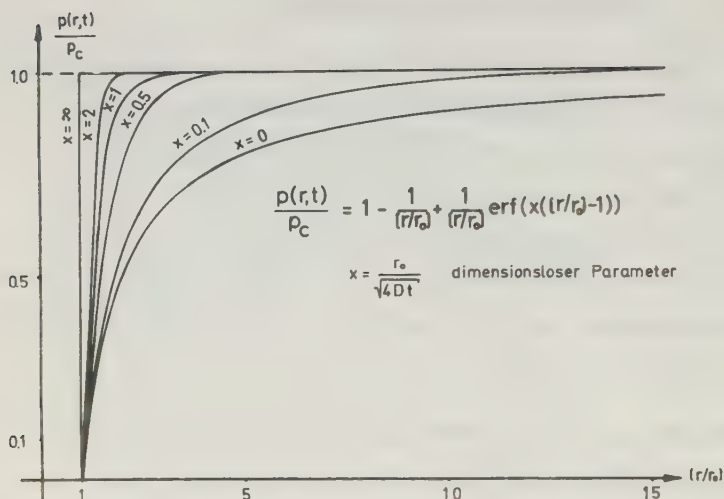


Abb.11: pO_2 -Verlauf im Diffusionsfeld einer blanken Elektrode mit halbkugelförmiger Oberfläche unter Berücksichtigung der zeitlichen Veränderungen vom Meßbeginn an bis zum stationären Zustand.

Die Zeit ist im Parameter x enthalten.

Der Gesamtfluß durch die Oberfläche der Elektrode ist dem Betrage nach

$$V(r_0, t) = 2\pi p_c K r_0 \left(1 + \frac{r_0}{\sqrt{4Dt}}\right). \quad (2,17)$$

Zum stationären Gesamtfluß tritt ein zeitabhängiger Anteil, der sich proportional zu $1/\sqrt{t}$ verhält. Zu jeder Zeit $t > 0$ ist er positiv, so daß der zeitabhängige Gesamtfluß stets größer ist als der stationäre. Das Meßsignal verhält sich dementsprechend.

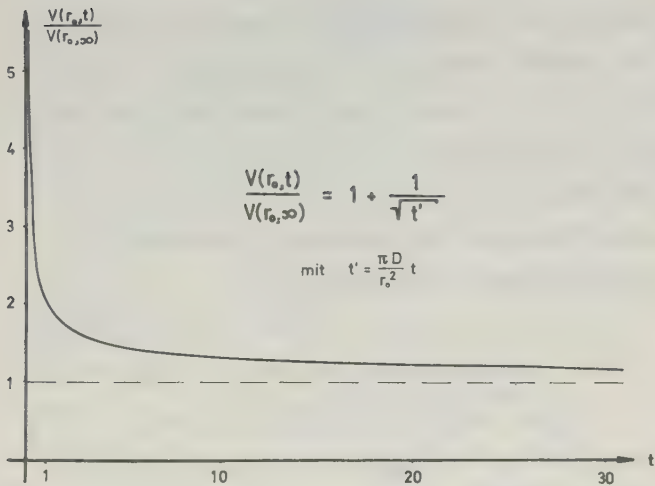


Abb.12: Gesamtfluß (=Meßsignal) durch die Oberfläche einer blanken, halbkugelförmigen Elektrode vom Meßbeginn an bis zum stationären Zustand. Der zeitlich variable Gesamtfluß ist auf den stationären bezogen. D ist die Diffusionskonstante des Mediums.

Die Einstellzeit t_{90} ist laut Definition aus der Relation

$$90\% = \frac{V(r_0, t)}{V(r_0)} \cdot 100\% \quad (2,17)$$

zu erhalten und gibt an, wann das zeitlich veränderliche Meßsignal $V(r_0, t)$ 90% des stationären $V(r_0)$ beträgt. Aus (2,17) folgt

$$t_{90} = (1/\pi D)(0.9r_0)^2. \quad (2,17'')$$

Je kleiner der Elektrodenradius, umso kleiner ist für die blanke Elektrode die Einstellzeit. Diese Abhängigkeit ist quadratisch. Ferner geht der Ausgleich der zeitabhängigen pO_2 -Verteilung und damit der Übergang vom zeitlich veränderlichen zum stationären Meßsignal umso schneller, je größer die Diffusionskonstante des Mediums ist.

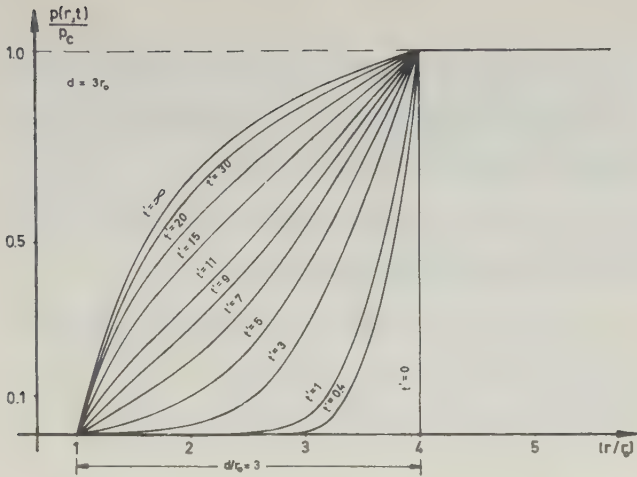
ii) Membranbespannte Elektrode - Einstellzeit
- RW-Problem (32)

Das Meßmedium vor der membranüberzogenen Elektrode sei gerührt. Zum Zeitpunkt $t=0$ wie für alle $t > 0$ ist dann im Medium $p = p_c$. In der Membran sei zu Meßbeginn kein O_2 , also $p=0$. Unter diesen Bedingungen ergibt sich über DGL (2,0) folgende pO_2 -Verteilung in der Membran mit der Diffusionskonstanten D_1 :

$$p(r,t) = p_c \frac{r_0+d}{d} \left(1 - \frac{r-r_0}{r}\right) + p_c \frac{2}{r} \left(\frac{r_0+d}{r}\right) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos n\pi}{n} \sin \frac{n\pi(r-r_0)}{d} \times \\ \times \exp\left(-D_1 \frac{n^2 \pi^2}{d^2} t\right) \quad (2,24)$$

Herrscht in der Membran zu Meßbeginn überall ein $pO_2=p_0$, ist also bereits O_2 in der Membran vorhanden, so ergibt sich [vgl. 12]

$$p(r,t) = p_c \frac{r_0+d}{d} \left(1 - \frac{r-r_0}{r}\right) + \frac{2}{r} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \left\{ p_c \left(\frac{r_0+d}{d}\right) \cos n\pi + \right. \\ \left. + p_0 \left(1 - \cos \frac{n\pi(r-r_0)}{d}\right) \right\} \sin \frac{n\pi(r-r_0)}{d} \exp\left(-D_1 \frac{n^2 \pi^2}{d^2} t\right).$$



$$\frac{p(r,t)}{p_c} = \left(1 + \frac{1}{d/r_0}\right) \left(1 - \frac{1}{(r/r_0)}\right) + \frac{2}{\pi} \frac{1 + d/r_0}{(r/r_0)} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos n\pi}{n} \sin \frac{n\pi}{d/r_0} ((r/r_0) - 1) \exp\left(-\frac{n^2}{(d/r_0)^2} t'\right)$$

mit $t' = D_1 \left(\frac{\pi}{r_0}\right)^2 t$

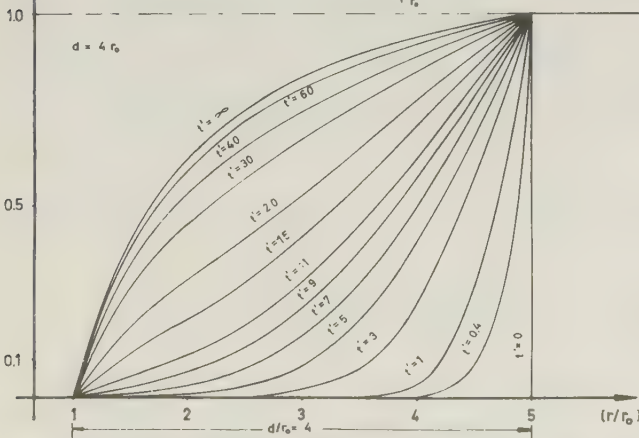


Abb.13: Zeitabhängiger pO_2 -Verlauf in der Membran einer Elektrode mit halbkugelförmiger Oberfläche bei gerührtem Meßmedium. Die Membrandicke beträgt in 13a $d=3r_0$, in 13b $d=4r_0$. Die Zeit t ist über t' der Kurvenparameter.

Abb.13 zeigt für $p_0=0$ gemäß (2,24), wie die Membran vom Medium her mit O_2 quasi "vollläuft", bis das Fließgleichgewicht erreicht ist.

Der Fluß durch die Elektrodenoberfläche (s.Abb.14) ergibt sich aus (2,24) und (1,0) zu

$$V(r_0, t) = 2\pi K_1 p_c \frac{r_0 + d}{d} r_0 \left(1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \exp\left(-D_1 \frac{n^2 \pi^2}{d^2} t\right) \right) \quad (2,24')$$

dem Betrage nach.

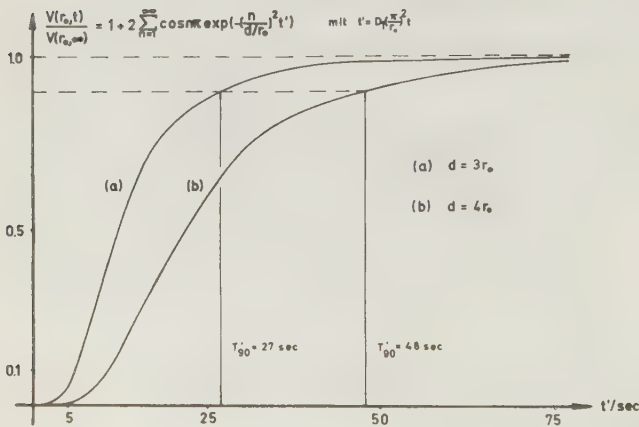


Abb.14: Zeitabhängiger Gesamtfluß durch die Oberfläche einer membranbespannten, halbkugelförmigen Elektrode bei gerührtem Meßmedium, bezogen auf den stationären Gesamtfluß bei $r=r_0$; t'_{90} gibt die Zeit an, die vergeht, bis das Meßsignal auf 90% des stationären angestiegen ist. Unter Berücksichtigung des Faktors $D_1 (\pi/r_0)^2$ ergibt sich daraus t_{90} , die Einstellzeit der Elektrode.

Zum stationären Gesamtfluß tritt auch hier ein zeitabhängiger Anteil. Vergleichsweise sei der Gesamtfluß durch die Grenzfläche Membran/Medium berechnet:

$$V(r_0+d, t) = 2\pi K_1 p_c \frac{r_0+d}{d} r_0 \left(1 + 2 \frac{r_0+d}{r_0} \sum_{n=1}^{\infty} \exp(-D_1 \frac{n^2 \pi^2}{d^2} t)\right) \quad (2,24'')$$

Zu jedem Zeitpunkt $t > 0$ ist der Betrag des Gesamtflusses an dieser Stelle größer als der durch die Elektrodenoberfläche. Das ist verständlich, da die bei $r=r_0+d$ in die Membran eintretenden O_2 -Partikel eine gewisse Zeit benötigen, um nach $r=r_0$ zu kommen. Im stationären Zustand treten (wegen der Erhaltung der O_2 -Partikelzahl) in jede Kugelzone ebenso viele O_2 -Partikel ein, wie sie verlassen. Der Gesamtfluß bei $r=r_0+d$ und der bei $r=r_0$ sind gleich. Das folgt unmittelbar aus (2,24') und (2,24'') für $t \rightarrow \infty$.

Die Einstellzeit der Elektrode bei gerührtem Medium ist nach (2,17') und (2,24') aus der Relation

$$0.1 = 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n-1} \exp(-D_1 \frac{n^2 \pi^2}{d^2} t_{90}) \quad (2,24''')$$

berechenbar. Wird die Summe nach dem ersten Glied abgebrochen, läßt sich t_{90} eliminieren. In erster Näherung ist dann

$$t_{90} \approx \frac{d^2}{D_1 \pi^2} \ln(20). \quad (2,24''')$$

Die Einstellzeit t_{90} kann klein gehalten werden, wenn

1. das Diffusionsvermögen der Membran gut,
d.h. D_1 groß,
2. die Membrandicke d klein

sind.

Die Voraussetzungen für eine kleine Einstellzeit und die für einen kleinen Einzugsbereich (in Äquivalenz mit einem kleinen Rühreffekt, vgl. S. 28) der membranbespannten, halbkugelförmigen Pt-Elektrode zeigen damit gegensinniges Verhalten.

Es bleibt schließlich zu klären, wie das zeitlich veränderliche Diffusionsfeld bei ungerührtem Medium beschrieben werden kann. Entsprechend dem stationären Fall sei vorausgesetzt, daß der Teilchenfluß die Grenzfläche Membran/Medium widerstandslos passieren kann, und zwar zu jeder Zeit $t > 0$.

Die pO_2 -Verteilung im Diffusionsfeld der Elektrode, das sich entsprechend zu stationärem Fall auf Membran und Meßmedium ausdehnt, wird über die DGL (2,0) wie folgt beschrieben:

$$p(r,t) = p_c \frac{r_0 + d}{d} \frac{\sigma}{1+\sigma} \left(1 - \frac{r_0}{r}\right) + p_c \frac{K_1 K_2}{r} \sqrt{\frac{D_1}{D_2}} \frac{2}{\pi} \times \\ \times \int_0^\infty \frac{(r_1 \alpha \cos \alpha d - \sin \alpha d) \sin \alpha (r - r_0) \exp(-D_1 \alpha^2 t)}{(\alpha (K_1 \cos \alpha d + k \sin \alpha d)^2 + (K_2 \sqrt{\frac{D_1}{D_2}} \sin \alpha d)^2)} d\alpha$$

$$\text{in } r_0 \leq r \leq r_0 + d \text{ (Membran),} \quad (2,31)$$

$$p(r,t) = p_c \left(1 - \frac{1}{1+\sigma} \frac{r_1}{r}\right) + \\ + p_c \frac{K_1 K_2}{r} \sqrt{\frac{D_1}{D_2}} \int_0^\infty \frac{(r_1 \alpha \cos \alpha d - \sin \alpha d) \exp(-D_1 \alpha^2 t)}{(\alpha (K_1 \cos \alpha d + k \sin \alpha d)^2 + (K_2 \sqrt{\frac{D_1}{D_2}} \sin \alpha d)^2)} d\alpha \times \\ \times ((K_1 \cos \alpha d + k \sin \alpha d) \sin \alpha \sqrt{\frac{D_1}{D_2}} (r - r_1) + K_2 \sqrt{\frac{D_1}{D_2}} \sin \alpha d \cos \alpha \sqrt{\frac{D_1}{D_2}} \times \\ \times (r - r_1)) \frac{d\alpha}{\alpha}$$

$$\text{in } r \geq r_0 + d \text{ (Medium).}$$

Dabei bedeuten $\sigma = \frac{K_2}{K_1} \frac{d}{r_0}$, $k = \frac{K_2 - K_1}{K_1}$ und $r_1 = r_0 + d$.

Der Gesamtfluß durch die Elektrodenoberfläche beschreibt das zeitliche Verhalten des Meßsignals bei einer pO_2 -Messung in einem ungerührten Medium. Er ergibt sich aus (2,27) dem Betrage nach zu

$$V(r_0, t) = 2\pi p_c K_2 \frac{r_0 + d}{1 + \sigma} (1 + K_1^2 (1 + \sigma)) \sqrt{\frac{D_1}{D_2}} \frac{2r_0}{r_1} \times \\ \times \int_0^\infty \frac{(r_1 \alpha \cos \alpha d - \sin \alpha d) \exp(-D_1 \alpha^2 t) \alpha}{\alpha (K_1 \alpha \cos \alpha d + k \sin \alpha d)^2 + (\alpha K_2 \sqrt{\frac{D_1}{D_2}} \sin \alpha d)^2} d\alpha \quad (2,31')$$

Für die Einstellzeit t_{90} läßt sich entsprechend der Definition folgende Relation angeben:

$$0.1 = (1 + \sigma) K_1^2 \sqrt{\frac{D_1}{D_2}} \frac{2r_0}{r_1} \times \\ \times \int_0^\infty \frac{(\sin \alpha d - r_1 \alpha \cos \alpha d) \exp(-D_1 \alpha^2 t_{90}) \alpha}{\alpha (K_1 \alpha \cos \alpha d + k \sin \alpha d)^2 + (\alpha K_2 \sqrt{\frac{D_1}{D_2}} \sin \alpha d)^2} d\alpha. \quad (2,31'')$$

Sie läßt sich nicht explizit nach t_{90} auflösen.

b) Pt-Elektrode mit ebener, kreisförmiger Oberfläche - zylindersymmetrisches RW-Problem

α) Vorbemerkung

In der Praxis der pO_2 -Messung werden Pt-Elektroden mit ebener Oberfläche am häufigsten verwendet. Die reduzierende Elektrode besteht aus einem in Glas

eingeschmolzenen, gerade abgeschnittenen Pt-Draht mit meist kreisrunder Oberfläche. Die Diffusionsverhältnisse an einer solchen Elektrode lassen sich nicht so ausführlich behandeln wie an der Elektrode mit halbkugelförmiger Oberfläche. Jedoch haben Ergebnisse des letzten Abschnittes in gewisser Näherung auch für die vorliegende Oberflächenform Geltung.

β) Stationäre Verhältnisse

Die DGl (1,1') nimmt unter Berücksichtigung der vorhandenen Zylindersymmetrie (Abb.15) die Form

$$\frac{\partial^2 p}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} = 0 \quad (2,38)$$

an.

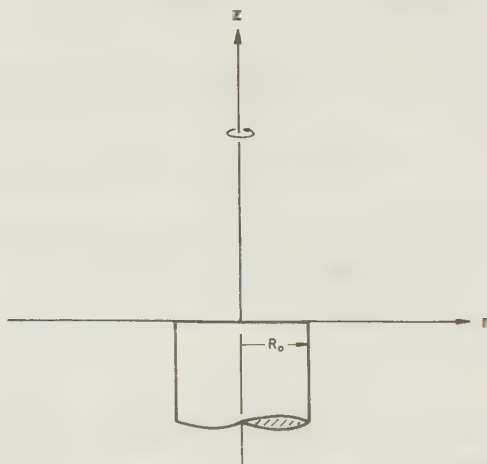


Abb.15: Blanke Pt-Elektrode mit ebener, kreisförmiger Oberfläche (Radius R_0); z und r sind Zylinderkoordinaten.

Die p_{O_2} -Verteilung im Diffusionsfeld der ebenen, kreisförmigen Elektrode mit blanker Oberfläche wird durch die Lösung von (2,30)

$$p(r,z) = p_c \left(1 - \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\sin(\tau R_0)}{\tau} I_0(\tau r) \exp(-\tau z) d\tau \right) \quad (2,42)$$

beschrieben.

I_0 ist dabei die BESSELFunktion nullter Ordnung, R_0 der Elektrodenradius.

Zur Darstellung des Diffusionsfeldes (Abb.16) gemäß (2,42) muß das Integral numerisch ausgewertet werden.

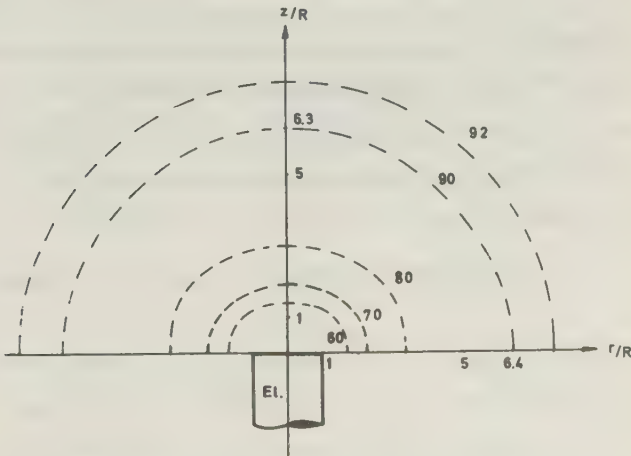


Abb.16: Isobaren im Diffusionsfeld einer blanken Pt-Elektrode mit ebener, kreisförmiger Oberfläche. In großer Entfernung vom Oberflächenzentrum gehen die Isobarenflächen in Kugelflächen über. Die den Einzugsbereich begrenzende Isobarenfläche schneidet die z -Achse bei $z_{90} = 6.3R_0$, die r -Achse bei $R_{90} = 6.4R_0$ (vgl. auch Abb.18).

Speziell der pO_2 -Verlauf in der Ebene $z=0$ und längs der z -Achse läßt sich explizit ausdrücken. Es ist

$$p(r,0) = \begin{cases} 0 & \text{für } r \leq R_0 \\ p_c(1-2/\pi \arcsin \frac{R}{r}) & \text{für } r \geq R_0 \end{cases} \quad (2,42')$$

und
 $p(0,z) = p_c(1-2/\pi \arctan \frac{R}{z})$ für $z \neq 0$.

(2,42') liefert gleichzeitig eine Abschätzung für die pO_2 -Verteilung im Diffusionsfeld. Stets gilt

$$p(r,0) \leq p(r,z) \leq p_c.$$

Der Gesamtfluß durch die kreisförmige Oberfläche ist dem Betrage nach

$$V = 4p_c K R_0. \quad (2,52)$$

Er verändert sich proportional dem Elektrodenradius und der Diffusionsleitfähigkeit des Mediums für O_2 .

Ein interessantes Verhalten zeigt der Stromdichtevektor $\vec{v}$ an der Elektrodenoberfläche (Abb.17).

Sein Betrag ergibt sich für $r < R_0$ und $z = 0$ zu

$$v(r,0) = \frac{2}{\pi} p_c K \frac{1}{\sqrt{R_0^2 - r^2}}. \quad (2,51)$$

Zum Oberflächenrand hin wächst $v(r,0)$ immer stärker an, jedoch so, daß der Gesamtfluß durch die Oberfläche endlich bleibt. Die durch die Einheitsfläche tretenden Diffusionsflußlinien werden zum Rand hin immer dichter zusammengedrängt.

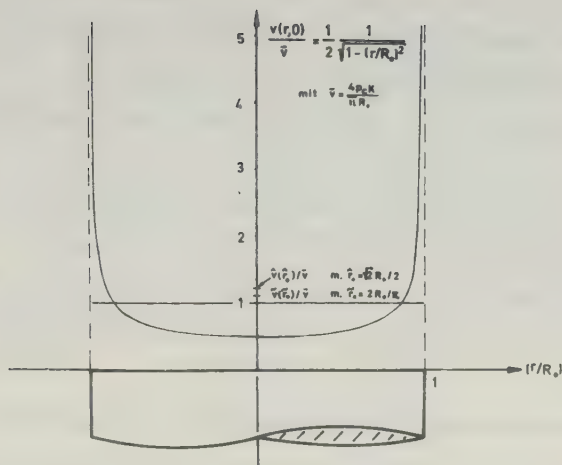


Abb.17: Stromdichte durch die ebene, kreisförmige Elektrodenoberfläche bezogen auf die mittlere Stromdichte $\bar{v}$. Zum Vergleich sind die auf $\bar{v}$ bezogenen Stromdichten $\hat{v}$ und $\tilde{v}$ angegeben, die sich an einer Halbkugeloberfläche gleicher Flächengröße ($\hat{r}_0 = \sqrt{2}R_0/2$) bzw. gleichem Gesamtfluß ($\tilde{r}_0 = 2R_0/2$) einstellen.

Als mittlerer Stromdichtevektor an der Oberfläche ergibt sich dem Betrage nach

$$\bar{v} = 2v(0,0) = p_c K \frac{4}{\pi R_0} . \quad (2,51')$$

Soweit lassen sich die Diffusionsverhältnisse an der ebenen, kreisförmigen Elektrodenoberfläche unmittelbar aus der DGl (2,38) ableiten. Wollte man in der Analyse der Diffusionsfelder entsprechend zur Elektrode mit halbkugelförmiger Oberfläche fort-

fahren, müßte man an dieser Stelle zu näherungsweisen Berechnungsverfahren (u.a. [40]) übergehen. Bevor ein solches Verfahren zur Berechnung des Diffusionsfeldes einer ebenen, quadratischen Oberfläche explizit durchgeführt wird, sei noch einmal auf die halbkugelförmige Oberfläche Bezug genommen. Gewisse Ergebnisse stellen für die Praxis hinreichend gute Näherungen an die Diffusionsverhältnisse der ebenen, kreisförmigen Elektrodenoberfläche dar.

g) Vergleich mit der halbkugelförmigen Elektrode

Für sehr große r und z gegen den Radius R_0 ($r, z \gg R_0$) kann die pO_2 -Verteilung im Diffusionsfeld der ebenen, kreisförmigen Elektrode näherungsweise durch

$$p(r) = p_c \left(1 - \frac{2}{\pi} \frac{R_0}{r}\right) \quad (2,45)$$

beschrieben werden, d.h. durch das Diffusionsfeld einer blanken, halbkugelförmigen Elektrode vom Radius $r_0 = \frac{2}{\pi} R_0$ gemäß (2,11). In großer Entfernung von der jeweiligen Oberfläche unterscheiden sich die Diffusionsfelder beider Elektrodenformen praktisch nicht mehr. Die Isobarenflächen der Abb.16 gehen in Kugelflächen über.

Eine halbkugelförmige Elektrode vom Radius $r_0 = \frac{2}{\pi} R_0$ hat den gleichen Gesamtfluß wie die ebene, kreisförmige vom Radius R_0 .

Es ist dem Betrage nach

$$V_{HK} = 2\pi p_c K r_0 \quad \text{für die Halbkugelform,}$$

$$V_K = 4p_c K R_0 \quad \text{für die Kreisflächenform,}$$

folglich $V_{HK} = V_K$ mit $r_0 = \frac{2}{\pi} R_0$.

Soll also das Diffusionsfeld einer ebenen, kreisförmigen Elektrode näherungsweise beschrieben werden, so kann dies durch das Diffusionsfeld einer halbkugelförmigen mit gleichem Gesamtfluß wie diese geschehen.

Abb.18 zeigt die Annäherung an den pO_2 -Verlauf in der Ebene der Elektrodenoberfläche, also für beliebiges r bei $z = 0$, und an den pO_2 -Verlauf in Richtung der z -Achse, also für beliebiges z und $r = 0$. Die Angabe des Einzugsbereiches für die herausgegriffenen pO_2 -Verläufe soll die Annäherung verdeutlichen.

In der Praxis verschafft man sich vielfach einen angenäherten Überblick über die Diffusionsverhältnisse einer ebenen, kreisförmigen Elektrode, indem man die einer halbkugelförmigen mit gleicher Oberflächengröße heranzieht. Aus

$$F_{HK} = \pi R_0^2 \quad \text{für die Kreisflächenform}$$

$$F_K = 2\pi r_0^2 \quad \text{für die Halbkugelform}$$

und der Forderung $F_{HK} = F_K$

müßte dann $r_0 = \sqrt{2} R_0 / 2$

sein.

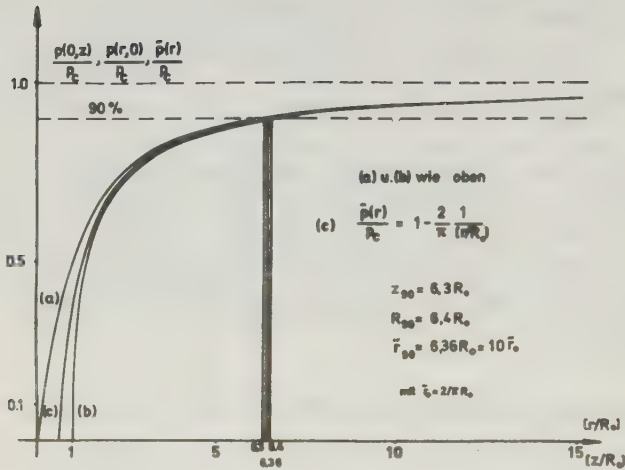


Abb.18: p_{O_2} -Verlauf in der Ebene $z = 0$ und in z -Richtung des Diffusionsfeldes einer blanken Elektrode mit ebener, kreisförmiger Oberfläche, verglichen mit dem einer halbkugelförmigen bei gleichem Oberflächengesamtfluß ($\bar{r}_0 = 2R_0/\pi$). z_{90} , R_{90} geben in z -Richtung und in der z -Ebene die Entfernung der Isobarenfläche von der kreisförmigen, r_{90} die von der halbkugelförmigen Oberfläche an, die den Einzugsbereich begrenzt.

Dieser Radius führt zu der Näherungsdarstellung

$$p(r) = p_c \left(1 - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{R_0}{r} \right) \quad (2,55)$$

Diese strebt zwar auch asymptotisch gegen p_c , aber schlechter als (2,45). Sie ist von der eigentlichen asymptotischen Näherung für das Diffusionsfeld der ebenen, kreisförmigen Elektrodenoberfläche verschieden.

Abb.19 zeigt die Annäherung entsprechend zu Abb.18, jedoch über den pO_2 -Verlauf einer halbkugelförmigen Elektrode bei gleicher Oberflächengröße. Die Angabe des Einzugsbereiches des näherungsweisen pO_2 -Verlaufs ist wesentlich unschärfer als in Abb.18.

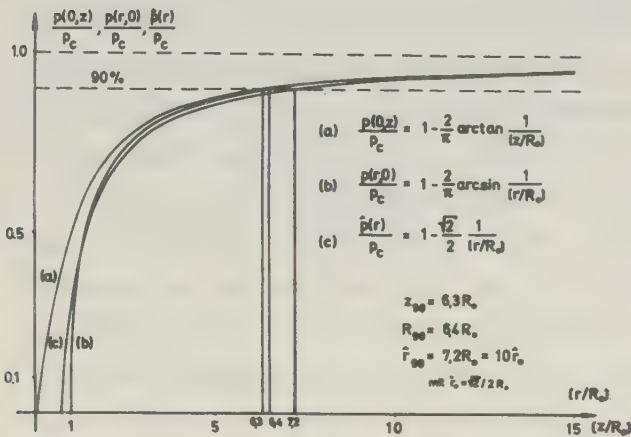


Abb.19: pO_2 -Verlauf in der Ebene $z = 0$ und in z -Richtung des Diffusionsfeldes einer blanken Elektrode mit ebener, kreisförmiger Oberfläche, verglichen mit dem einer blanken Elektrode mit halbkugelförmiger Oberfläche gleicher Flächengröße ($\hat{r}_0 = \sqrt{2} R_0 / 2$). z_{90} , R_{90} und r_{90} sind entsprechend zu Abb.18 angegeben.

- c) Pt-Elektrode mit ebener, quadratischer
Oberfläche
- RW-Problem im kartesischen Koordinatensystem

α) Vorbemerkung

Es erhebt sich im Anschluß an die behandelten Elektrodenformen die Frage nach weiteren, für die pO_2 -Messung eventuell günstigeren Oberflächenformen.

War die pO_2 -Verteilung im Diffusionsfeld der ebenen, kreisförmigen Elektrodenoberfläche im Gegensatz zur halbkugelförmigen nur unter gewissen Einschränkungen als Lösung einer Differentialgleichung darstellbar, so ist dies schon bei quadratischen oder rechteckförmigen nicht mehr möglich. Näherungsmethoden werden erforderlich. Diese gehen nicht wie bisher unmittelbar von der Diffusionsgleichung, also der Differentialgleichung, aus sondern von einer "Ersatz"-gleichung, einer ihr entsprechenden Differenzengleichung. Derartige Verfahren führen auf Näherungslösungen, die die wahre pO_2 -Verteilung im Diffusionsfeld nur bis auf einen gewissen Fehler genau beschreiben. Schon bei bescheidenen Ansprüchen an die Genauigkeit entsteht ein erheblicher Rechenaufwand, so daß derartige Näherungsmethoden in der Regel nur mit Hilfe von Rechenmaschinen durchzuführen sind.

β) Stationäre Verhältnisse - Blanke Elektrode

Das räumliche Diffusionsfeld einer ebenen, quadratischen Elektrodenoberfläche wird über ein Näherungsverfahren mit Fehlerangabe berechnet. Im Hinblick auf die verfügbare Rechengeschwindigkeit und Speicherkapazität bleibt die Berechnung auf den stationären Fall einer blanken Elektrode, auf die LAPLACEsche DGl bzw. Differenzengleichung, beschränkt. Diese liegt im x, y, z -Koordinatensystem in der Form

$$\Delta p \equiv \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} = 0 \quad (2,56)$$

vor.

Beim Übergang zur Differenzengleichung wird der LAPLACEoperator Δ durch einen Differenzenoperator ersetzt. Dieser besagt in der Differenzengleichung

$$\Delta_h P = 0 \quad (2,58)$$

nichts anderes, als daß der Druck P für jeden Gitterpunkt eines im Diffusionsraum aufgespannten Raumgitters aus den Druckwerten der Nachbarpunkte zu berechnen ist. Ist o ein solcher Punkt des Raumgitters, P_o sein zu berechnender Druckwert, so ist

$$\sum_{i=1}^6 P_i - 6P_o = 0 \quad (2,61)$$

gemäß dem Schema



die explizite Gestalt der Differenzengleichung. Von o haben die Nachbarpunkte jeweils den Abstand h . Je kleiner h ist, umso genauer beschreibt die Näherungslösung $P(x,y,z)$ die wahre pO_2 -Verteilung im Diffusionsfeld.

Im Gegensatz zu den wahren Druckwerten werden die Näherungswerte mit großen Buchstaben benannt.

Die pO_2 -Verteilung im Diffusionsfeld einer ebenen, quadratischen Pt-Oberfläche der Kantenlänge $2R$ wird nach den im Anhang enthaltenen ALGOL-Programmen näherungsweise ermittelt. Die berechneten Druckwerte sind den Schnittpunkten des Raumgitters der Maschenweite h im Diffusionsraum zuzuordnen (Abb.20). Der Abstand der Gitterpunkte ist $h = R/4$; in Abb.20 wurde nur jeder achte berücksichtigt.

Die Berechnung läßt sich auf einen Teilbereich des Diffusionsraumes beschränken. Durch Spiegelung ist daraus die pO_2 -Verteilung des gesamten Diffusionsfeldes zu gewinnen. Ferner beschränkt sich die Näherungslösung auf $8R$ des in Wirklichkeit unbegrenzten Diffusionsraumes, also jeweils $32h$ in jeder Koordinatenrichtung. Das Gitter umfaßt folglich im betrachteten Teilbereich (vgl. Abb.20) 18 513 Punkte. Sieht man von den Gitterpunkten ab, an denen der P -Wert während der gesamten Rechnung unverändert bleibt, so ist für ca. 18000 Punkte je ein P -Wert zu berechnen.

Die Punktmenge wird in einer Iterationsfolge zyklisch durchlaufen, bis eine gewisse Fehlerschranke unterschritten ist.

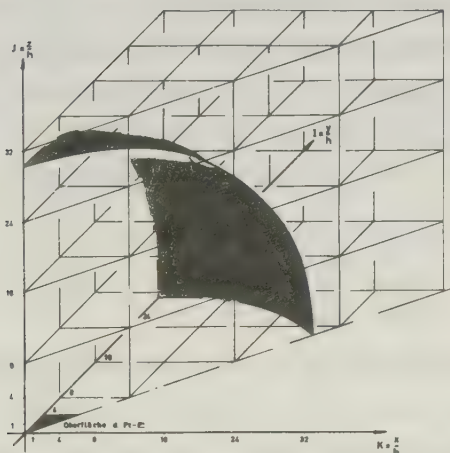


Abb.20: Teil des Diffusionsraumes einer blanken Pt-Elektrode mit ebener, quadratischer Oberfläche, für den näherungsweise die pO_2 -Verteilung (s. Anhang A0) berechnet ist. Herausgehoben ist die den Einzugsbereich begrenzende Isobarenfläche. Durch Spiegelung ist die gesamte Isobarenfläche zu erhalten. Nur jeder achte Punkt des Raumgitters ist gezeichnet ($h = 2R$).

In Abb.20 ist die Isobarenfläche herausgehoben, die den Einzugsbereich der Elektrode begrenzt. Die P-Werte dieser Fläche sind bis auf einen Fehler kleiner als 0.4% des zu messenden $pO_2 = p_c$ bestimmt (Tab. IV, s. an 1)

Die Fehlerabschätzung für die P-Werte innerhalb der genannten Isobarenfläche ist gröber. Übersichtsweise beträgt die Abweichung der Näherungslösung von der wahren pO_2 -Verteilung für diese Gitterpunkte etwa 2.3%, bezogen auf p_c (Tab. VIII, S. 94). Zur Beurteilung der Größe des Einzugsbereiches wird die Entfernung der begrenzenden Isobarenfläche vom Mittelpunkt der Elektrodenoberfläche in I-(y-), J-(z-) Richtung und in Richtung der Winkelhalbierenden der K-I-(x-y-)Ebene herangezogen.

Es ist

$$\begin{aligned} y_{90} &= r_J \approx 7.6 R \\ z_{90} &= r_I \approx 7.7 R & (2,61') \\ x/y_{90} &= r_{IK} \approx 7.8 R . \end{aligned}$$

Der geringe Unterschied dieser drei Entfernungen wie auch die Form der den Einzugsbereich begrenzenden Isobarenfläche (Abb. 20) stimmen mit der Feststellung des letzten Abschnitts überein, daß sich mit wachsender Entfernung von der Elektrodenoberfläche die Isobarenflächen Kugelflächen annähern.

Im Sinne dieser Annäherung sei angenommen, der Einzugsbereich einer halbkugelförmigen, kreisförmigen und quadratischen Elektrodenoberfläche sei jeweils kugelsymmetrisch. Ferner sei die Gleichheit der zugehörigen Radien r_{90} angenommen. Wegen

$$\begin{aligned} r_{90} &= 10.0 r_0 \text{ für die Halbkugel} \\ r_{90} &\approx 6.4 R_0 \quad " \quad \text{Kreisfläche} \quad (2,61'') \\ r_{90} &\approx 7.7 R \quad " \quad \text{das Quadrat} \end{aligned}$$

muß

$$r_0 \approx 0.6 R_0$$

und

$$R \approx 0.8 R_0$$

sein. Bei diesen Abmessungen der einzelnen Elektroden stimmen ihre Einzugsbereiche - zumindest angenähert - untereinander überein.

Nimmt man ferner an, der Einzugsbereich der Kreisfläche stimmt mit dem des Quadrates nur dann überein (vgl. Abschnitt b, σ), wenn ihr Gesamtfluß gleich dem der quadratischen Oberfläche ist, so folgt aus

$$V_K = 4Kp_C R_0 \quad \text{für die Kreisfläche}$$

$$\text{mit } R_0 \approx 1.2 R \quad \text{gemäß (2,61'')}$$

$$V_Q \approx 4.8 Kp_C R \quad \text{als Gesamtfluß durch das}$$

Quadrat der Kantenlänge $2R$ und somit für ihr Meßsignal.

Die Diffusionsfelder weiterer Elektrodenformen können über das genannte Näherungsverfahren entsprechend berechnet werden. Quadratische Oberflächenformen lassen sich zu rechteckigen zusammensetzen und ihre pO_2 -Verteilung im jeweiligen Diffusionsfeld ebenfalls bei gleichmäßigem Abstand der Gitterpunkte bestimmen. Insbesondere ist das Diffusionsfeld von Mehrfachelektroden mit mehreren einzelnen quadratischen Oberflächenteilen so erfaßbar.

3) Diskussion der Ergebnisse

Die Pt-Elektrode entzieht bei der auf dem Prinzip der polarographischen Analyse beruhenden pO_2 -Messung dem Meßmedium O_2 . Dieser wird per Diffusion zur reduzierenden Elektrodenoberfläche trans-

portiert. Dadurch entsteht im Diffusionsfeld der Elektrode eine von der Oberflächengestalt abhängende p_{O_2} -Verteilung. Diese kann durch eine entsprechende Lösung der Diffusionsgleichung beschrieben werden (vgl. Tafel I). Daraus leiten sich einmal das Meßsignal als O_2 -Partikelfluß durch die Oberfläche selbst, zum anderen die für die Messung charakteristischen Größen wie Einzugsbereich, Rühreffekt und Einstellzeit der Elektrode ab.

Der Einzugsbereich gibt an, aus welchem Bereich des Diffusionsraumes der für die Messung benötigte O_2 stammt; bzw. bis zu welcher Entfernung von der Oberfläche der Elektrode aus Störungen wie Konvektion im Meßmedium das Meßsignal beeinflussen. Begrenzen läßt sich dieser Bereich für Elektroden mit halbkugelförmiger, kreisförmiger und quadratischer Oberfläche in guter Näherung jeweils durch eine Kugeloberfläche. Denkt man sich die genannten Elektrodenformen aus einem Pt-Draht vom Radius R_0 konstruiert, ist ihr Einzugsbereich folgender Übersicht zu entnehmen (vgl. auch Tafel I):

Oberfl. form	Einzugsbereich	Gesamtfluß
Halbkugel	$= 10 R_0$	$\pi/2 V_K \approx 1.6 V_K$
Kreis	$\approx 6.4 R_0$	$V_K = 4 p_c K R_0$
Quadrat	$\approx 5.4 R_0$ ($7.7 R_0$)	$\approx 0.85 V_K$ ($1.2 V_K$)

Danach hat die quadratische Oberfläche den kleinsten Einzugsbereich, allerdings auch das kleinste

Oberfl.- form d.El.	Zustand	pO ₂ -Verteilung auf das Diffusionsmedium	Ge
Halbkugel (Rad. r ₀)	stationär, blanke El.	$p(r) = p_c(1 - \frac{r}{r_0})$	V
	stationär, membranbe- spannte El. gerührtes Medium	$p(r) = p_c(\frac{r_0+d}{d})(1 - \frac{r}{r_0})$	V
	stationär, membranbe- spannte El. ungerührtes Medium	$p(r) = \begin{cases} p_c \frac{r_0+d}{d} \frac{r}{1+\sigma} (1 - \frac{r}{r_0}) & \text{in } r_0 \leq r \leq r_0 + d \\ p_c(1 - \frac{1}{1+\sigma} \frac{r_0+d}{r}) & \text{in } r_0 + d \leq r \end{cases}$	V
	zeitabhäng. blanke El.	$p(r,t) = p_c(1 - \frac{r}{r_0}) + p_{cr} \frac{r}{r_0} \operatorname{erfc}(\frac{r-r_0}{\sqrt{D_1 t}})$	V(
	zeitabhäng. membranbe- spannte El. gerührtes Medium	$p(r,t) = p_c(\frac{r_0+d}{d})(1 - \frac{r}{r_0}) + p_c \frac{2}{\pi} \frac{r_0+d}{r^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos n\bar{z}}{n} \sin \frac{n\bar{z}(r-r_0)}{d} \exp(-D_1 \frac{n^2 \bar{z}^2}{d^2} t)$	V(
	zeitabhäng. membranbe- spannte El. ungerührtes Medium	$p(r,t) = p_c \frac{r_0+d}{d} \frac{r}{1+\sigma} (1 - \frac{r}{r_0}) + p_c \frac{K_1 K_2}{2} \sqrt{\frac{D_1}{D_2}} \frac{2}{\pi} \sum_{\alpha} \int_0^{\infty} F(\alpha,t) \sin \alpha(r-r_0) d\alpha$ in $r_0 \leq r \leq r_0 + d$, $p(r,t) = p_c(1 - \frac{1}{1+\sigma} \frac{r}{r_1}) + p_c \frac{K_2}{2} \frac{1}{\pi} \sum_{\alpha} \int_0^{\infty} \frac{F(\alpha,t)}{\alpha} ((K_1 \alpha \cos \alpha d + k \sin \alpha d) \sin \alpha \sqrt{\frac{D_1}{D_2}} (r-r_1) + K_2 \sqrt{\frac{D_1}{D_2}} \sin \alpha d \cos \alpha \sqrt{\frac{D_1}{D_2}} (r-r_1)) d\alpha$ in $r_0 + d \leq r$ mit $F(\alpha,t) = \frac{(r_1 \alpha \cos \alpha d - \sin \alpha d) \exp(-D_1 \alpha^2 t)}{(K_1 \alpha \cos \alpha d + k \sin \alpha d)^2 + (K_2 \sqrt{\frac{D_1}{D_2}} \sin \alpha d)^2}$	V(
ebene Kreis- fläche (Rad. R ₀)	stationär blanke El.	$p(r,z) = p_c(1 - \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\sin(\bar{z} R_0)}{\bar{z}} I_0(\bar{z} r) \exp(-\bar{z} z) d\bar{z}$ $p(r) \cong p_c(1 - \frac{2}{\pi} \frac{R_0}{r_0})$ (näherungsweise)	V
ebenes Quadrat (Kanten- länge 2R)	stationär, blanke El.	$p(x,y,z)$ siehe Anhang A0 und Abb.20	V

Tafel I: Formelübersicht

Samtfluß(=Meßsignal)	Einzugsbereich	Rühreffekt	Einstellzeit
$2\pi K p_c r_o$	$r_{90} = 10 r_o$	$R = \frac{100\%}{1+d/r_o}$	.-.
$2\pi K_1 p_c (1 + \frac{r_o}{d}) r_o$	$r_{90} = \frac{(\frac{r_o}{d} + d) r_o}{\frac{r_o}{d} + 0.1 d}$ ($< r_o + d$)	.-.	.-.
$2\pi K_2 p_c \frac{1}{1+d} (r_o + d)$	$r_{90} = \frac{r_o (r_o + d)}{0.1 d + (1 - \frac{K_1}{K_2}) r_o}$ (für $d/9 \geq 1$)	$R = \frac{100\%}{1+d}$ mit $d = \frac{K_2}{K_1} \frac{d}{r_o}$	.-.
$r_o(t) = 2\pi p_c K r_o (1 + \frac{r_o}{d})$	.-.	.-.	$t_{90} = \frac{1}{\pi D} (0.9 r_o)^2$
$r_o(t) = 2\pi p_c K_1 \frac{r_o + d}{d} r_o \cdot$ $2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \exp(-D_1 \frac{n^2 \pi^2}{d^2} t)$	.-.	.-.	$t_{90} \approx \frac{d^2}{D_1 \pi^2} \ln 20$
$r_o(t) = 2\pi p_c K \frac{1}{1+d} (r_o + d) \cdot$ $\frac{(1+d)r_o}{r_o + d} K_1^2 \sqrt{\frac{D_1}{D_2}} \frac{1}{2} \cdot$ $\int_0^{\infty} F(\alpha, t) d\alpha$	.-.	.-.	aus folgender Relation bestimmbar: $0.1 = (1+d) K_1^2 \sqrt{\frac{D_1}{D_2}} \frac{2r_o}{\pi r_1} \cdot$ $\cdot \int_0^{\infty} \alpha F(\alpha, t_{90}) d\alpha$
$4K p_c R_o$	$z_{90} \approx 6.3 R_o$ $R_{90} \approx 6.4 R_o$	.-.	.-.
$4.8K p_c R$	$y_{90} \approx 7.6 R$ $z_{90} \approx 7.7 R$ $x/y_{90} \approx 7.8 R$	.-.	.-.

Meßsignal. Wird für die quadratische Oberflächenform ein Pt-Draht der halben Kantenlänge R_0 (nicht der halben Diagonalen wie oben) genommen, gelten die eingeklammerten Werte in der Übersicht. Dann hat die kreisförmige Oberfläche den kleinsten Einzugsbereich. In jedem Falle zeigen die ebenen Elektrodenformen gegenüber der halbkugelförmigen bei gleicher Pt-Drahtstärke den kleineren Einzugsbereich.

Die drei genannten Elektrodenformen haben trotzdem einen großen Einzugsbereich und sind folglich sehr störanfällig, wenn sie blank zur O_2 -Messung verwandt werden. Daher trennt eine Membran bestimmter Dicke d und Diffusionsleitfähigkeit K die Pt-Oberfläche vom Meßmedium. Ist das Meßmedium rührbar, erstreckt sich das Diffusionsfeld auf die Membran allein, sonst auch auf das Medium. Nur bei gerührtem Medium mißt die Elektrode dessen wirklichen pO_2 , den pO_2 an der Grenzfläche Membran/Medium. Bei ungerührtem Medium herrscht an dieser Stelle wegen des weiter ausgedehnten Diffusionsfeldes ein kleinerer pO_2 als der wahre. Diesen mißt die Elektrode. Seine Verfälschung gegenüber dem wahren pO_2 wird vom Rühreffekt (vgl. Tafel I) angegeben. Je kleiner der Rühreffekt, umso genauer die pO_2 -Messung im ungerührten Medium. Er steht in unmittelbarer Äquivalenz zum Einzugsbereich. Beide können durch geeignete Wahl der Membran klein gehalten werden. Dabei ist jedoch die dritte charakteristische Größe,

die Einstellzeit, zu berücksichtigen. Sie gibt an, wie schnell die Elektrode auf pO_2 -Änderungen im Meßmedium reagiert und soll dementsprechend klein sein. Um sowohl Rühreffekt wie Einstellzeit klein zu halten, ist folgendes zu fordern (vgl. Tafel I, membranbespannte, halbkugelförmige Elektrodenoberfläche):

	Rühreffekt	Einstellzeit
Membrandicke	d groß	d klein
Membrandiffus.-eigensch.	K_1 klein	D_1 groß

Diese Forderungen sind natürlich nicht gleichzeitig erfüllbar. Es sei jedoch vermerkt, daß sich, falls d um den Faktor a verändert wird, der Rühreffekt mit a, die Einstellzeit dagegen mit a^2 vergrößert oder verkleinert. Ferner ist nach dem HENRY-DALTONschen Gesetz

$$K_1 = \alpha_1 D_1$$

mit α_1 dem BUNSENSchen Löslichkeitskoeffizient für O_2 . Folglich ist für die Membran ein Material geeignet, das für O_2 einerseits einen großen Diffusionskoeffizienten D_1 , andererseits ein kleines Löslichkeitsvermögen α_1 besitzt. Dann ist der Forderung: großes D_1 bei kleinem K_1 , entsprochen.

Abschließend zeigen Tabelle II und III Rühreffekt und Einstellzeit einer ebenen, kreisförmigen

Pt-Elektrode vom Radius R_0 für eine Polyäthylenmembran und einer Hämoglobinlösung als Meßmedium. Bei der Berechnung wurde die gegebene Elektrodenform durch eine halbkugelförmige ersetzt, so daß beide Elektroden gleichen Gesamtfluß besitzen ($r_0 = 2R_0/\pi$).

Tabelle II: Rühreffekt

R_0 / [cm]	d / [cm]	d/ r_0	R / [%]
$7.5 \cdot 10^{-4}$	$6.5 \cdot 10^{-4}$	0.87	8.1
$\hat{=}$	12.5 "	1.67	4.4
$r_0 =$	19.0 "	2.53	3.0
$4.8 \cdot 10^{-4}$	25.0 "	3.33	2.3
	31.5 "	4.20	1.8

Dabei ist $K_2(\text{Medium}) = 1.3 \cdot 10^{-5}$ ml/cm·min·Atm [56],
 $K_1(\text{Membran}) = 8.0 \cdot 10^{-8}$ ml/cm·h·Torr [44],
 also $K_2/K_1 = 13.0$. (Medium: 35.5%ige Hämoglobinlösung,
 Membran: Polyäthylen mittlerer Dichte)

Tabelle III: Einstellzeit

r_0 / [cm]	d/ r_0	$t_{90}(\text{Gummi})$ / [s]	$t_{90}(\text{Polyäth.})$ / [s]
$4.8 \cdot 10^{-4}$	2	0.13	1.3
	3	0.30	3.0
	4	0.53	5.3

Dabei ist angenommen, Polyäthylen habe gegenüber Gummi eine 10-fach schlechtere Diffusionsleitfähigkeit für O_2 (für H_2 ist das Verhältnis 1:20 [35]).

Hauptteil B

MATHEMATISCHE GRUNDLAGEN DER THEORIE DER AUSGLEICHSVORGÄNGE AN Pt-ELEKTRODEN

1) Vorbemerkungen

Sei C_0 eine Fläche (Elektrodenoberfläche), die aus dem dreidimensionalen Raum R_3 an seinem Koordinatenursprung herausgeschnitten sei. C_∞ sei der im Unendlichen gedachte Rand von R_3 . Der zwischen C_0 und C_∞ gelegene Teilraum von R_3 sei mit B bezeichnet. $C_0 \cap C_\infty$ ist dann der Rand dieses Bereiches. (*)

Die Methoden zur Lösung der aus dem FOURIERSchen Ansatz

$$\vec{v} = -K \text{ grad } p \quad (1,0)$$

herleitbaren (u.a. [8], [23], [27], [53]) linearen, partiellen DGL zweiter Ordnung

$$D \Delta p = \frac{\partial p}{\partial t}, \quad (1,1)$$

der Diffusionsgleichung, unter den allgemeinen RB

$$\begin{aligned} p(C_0) &\equiv 0 \\ p(C_\infty) &\equiv p_c, \quad p_c = \text{const.}, \end{aligned}$$

sowie speziell hinzutretenden RB und AB richten sich nach der Gestalt von C_0 . Diese legt die Wahl eines geeigneten Koordinatensystems nahe und im Zusammenhang damit die entsprechende Darstellung des LAPLACEoperators.

(*) C_0 wird im Weiteren so gestaltet sein, daß alle Betrachtungen auf den oberen Halbraum beschränkt werden können. Durch Spiegelung an der Ebene $z=0$ wird stets eine Fortsetzung in den unteren Halbraum möglich sein.

Unter kugelsymmetrischen Bedingungen, bei alleiniger Abhängigkeit der Gestalt C_0 vom Radius, hat Δ die Form

$$\Delta \equiv \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} . \quad (1,2)$$

Ist C_0 rotationssymmetrisch zur Flächennormalen, empfiehlt es sich, Δ in Zylinderkoordinaten darzustellen. Es ist

$$\Delta \equiv \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} , \quad (1,3)$$

falls der Drehwinkel um die Flächennormale keine Rolle spielt.

Im kartesischen x,y,z-System ist schließlich

$$\Delta \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} . \quad (1,4)$$

Nur bei besonderer Gestalt von C_0 lassen sich die RW-Probleme der DGl (1,1) mit exakten Methoden behandeln, d.h. mit Methoden, die zu einer geschlossenen Form der Lösung führen.

2) Lösungen der Diffusionsgleichung

a) Kugelsymmetrisches RW-Problem

Ist C_0 kugelsymmetrisch, liegt in B die DGl

$$D \left(\frac{\partial^2 p}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial p}{\partial r} \right) = \frac{\partial p}{\partial t} \quad (2,0)$$

mit den RB

$$p(r) = 0 \text{ für } r = r_0, r_0: \text{Radius von } C_0$$

$$p(r) = p_c \text{ " } r \rightarrow \infty$$

und der AB

$$p(r, t) \equiv p_c \text{ für } t = 0, r \geq r_0 \text{ beliebig} \quad (2,1)$$

vor. Zu diesen allgemeinen RB und AB treten in

einzelnen Fällen spezielle hinzu.

α) Lösungsmethoden

i) Transformation auf ein eindimensionales Problem

Unter kugelsymmetrischen Bedingungen läßt sich das RW-Problem exakt lösen. Die DGL (1,1) mit Δ gemäß (1,2)

$$D\left(\frac{\partial^2 p}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial p}{\partial r}\right) = \frac{\partial p}{\partial t} \quad (2,2)$$

wird der Transformation

$$v = p \cdot r \quad (2,3)$$

unterworfen und sodann die transformierte DGL

$$D \frac{\partial^2 v}{\partial r^2} = \frac{\partial v}{\partial t} \quad (2,4)$$

mit den ebenso transformierten RB und AB gelöst. Für den stationären Fall, d.h. bei verschwindender rechter Seite, ist (2,4) eine gewöhnliche DGL, ihre Lösung sofort angebar. Unter nichtstationären Bedingungen ist das GAUSSsche Fehlerintegral eine partikuläre Lösung von (2,4), oder es führt die LAPLACetransformation zum Ziel.

ii) LAPLACetransformation

Ist $v(r,t)$ eine gegebene Funktion, mit r aus einem bestimmten Bereich und $t \geq 0$, so ist

$$\bar{v}(r,s) = \mathcal{L}\{v(r,t)\} = \int_0^{\infty} v(r,t) \exp(-st) dt \quad (2,5)$$

ihre LAPLACetransformierte bezüglich t [20], [20, I].

Diese Transformation auf die DGl (2,4) angewandt, führt von der partiellen DGl im Oberbereich zu einer gewöhnlichen DGl im Unterbereich, d.i.

$$D \frac{d^2 \bar{v}(r,s)}{dr^2} = -v(r,0) + s \cdot \bar{v}(r,s). \quad (2,6)$$

Dabei ist [20]

$$\mathcal{L} \left\{ \frac{\partial^2 v(r,t)}{\partial r^2} \right\} = \frac{d^2 \bar{v}(r,s)}{dr^2} \quad (2,7)$$

und

$$\mathcal{L} \left\{ \frac{\partial v(r,t)}{\partial t} \right\} = -v(r,0) + s \cdot \bar{v}(r,s)$$

mit s als Parameter.

Ist $\bar{v}(r,s)$ die gefundene Lösung von (2,6), muß diese in den Oberbereich zurücktransformiert werden. Das geschieht über die komplexe Umkehrformel [20], [21]

$$v(r,t) = \mathcal{L}^{-1} \{ \bar{v}(r,s) \} = \frac{1}{2\pi i} \int \bar{v}(r,\lambda) \exp(\lambda t) d\lambda. \quad (2,8)$$

Es ist $s = \lambda$ gesetzt und λ als komplexe Größe aufzufassen. Der Integrationsweg ist eine im Konvergenzbereich von (2,5) parallel zur imaginären Achse der λ -Ebene gelegene Gerade.

Unter gewissen Voraussetzungen und bei Abänderung des Integrationsweges kann das Integral (2,8) einmal über den Residuensatz der Funktionentheorie als Summe, zum anderen über einen HANKELschen Integrationsweg als reelles Integral ausgedrückt werden.

Das hängt von der Art und der Lage der Singularitäten ab, die der Integrant in der λ -Ebene besitzt.

B) Stationäre Verhältnisse

1) RW-Problem ($\propto 1$)

Ist p von t unabhängig, verschwindet die rechte Seite von (2,0) identisch. Die entstehende homogene DGL ist eine gewöhnliche, die über die Transformation (2,3) die Form

$$\frac{d^2 v}{dr^2} = 0 \quad (2,9)$$

annimmt. Deren allgemeine Lösung ist

$$v(r) = c_1 r + c_2. \quad (2,10)$$

Rücktransformation und Anpassen an die RB (2,1) führt auf die Lösung des RW-Problems

$$p(r) = p_c \left(1 - \frac{r}{r_0}\right). \quad (2,11)$$

ii) RW-Problem ($\propto 2$)

Der Bereich B ist in die Teilbereiche

$$B_1: \{r_0 \leq r \leq r_0 + d\}$$

$$B_2: \{r_0 + d \leq r < \infty\}$$

getrennt.

Ist $p(r) \equiv p_c$ in B_2 , ergibt sich aus der allgemeinen Lösung (2,10) und den RB von (2,1), wobei die zweite durch

$$p(r_0 + d) = p_c$$

zu ersetzen ist, die Lösung für B_1 :

$$p(r) = p_c \frac{r_0 + d}{d} \left(1 - \frac{r}{r_0}\right). \quad (2,12)$$

Falls in B_2 $p(r)$ nicht identisch konstant ist, muß auch für diesen Teilraum eine Lösung angegeben werden. Als zusätzliche RB wird dafür gefordert, daß an der Stelle $r = r_0 + d$ die Lösung $p(r)$ wie die Komponenten von $\vec{v}(r)$ gemäß (1,0) stetig sind.

Sind $p_1(r)$ und $p_2(r)$ die Lösungen in B_1 und B_2 , lauten die RB für die DGL (2,0) in der homogenen Form

$$p_1(r) = 0 \quad \text{für } r = r_0$$

$$p_2(r) = p_c \quad " \quad r \rightarrow \infty$$

$$p_1(r) = p_2(r) \quad " \quad r = r_0 + d$$

$$\lim_{r \rightarrow (r_0 + d)^-} K_1 \text{grad } p_1(r) = \lim_{r \rightarrow (r_0 + d)^+} K_2 \text{grad } p_2(r).$$

Über die allgemeine Lösung (2,10) und diese RB errechnet sich unmittelbar

$$p(r) = \begin{cases} p_1(r) = p_c \frac{r_0 + d}{d} \frac{\sigma}{1 + \sigma} \left(1 - \frac{r}{r_0}\right) & \text{für } B_1 \\ p_2(r) = p_c \left(1 - \frac{1}{1 + \sigma} \frac{r_0 + d}{r}\right) & \text{für } B_2 \end{cases} \quad (2,13)$$

mit

$$\sigma = \frac{K_2}{K_1} \frac{d}{r_0}.$$

7) Zeitabhängige Verhältnisse

1) RW-Problem (3.1)

Das GAUSSsche Fehlerintegral ist eine spezielle Lösung der nach (2,3) transformierten DGL (2,0).

Allgemein ist dann

$$p(r,t) = \frac{A}{r} \int_0^{\frac{r}{2\sqrt{Dt}}} \exp(-z^2) dz + \frac{B}{r} + C \quad (2,14)$$

mit Konstanten A,B,C eine Lösung von (2,0). Diese kann an die RB und AB (2,1) angepaßt werden. Es resultiert

$$p(r,t) = p_c(1 - \frac{r}{r_0}) + p_c \cdot \frac{r}{r_0} \operatorname{erf}(\frac{r-r_0}{2\sqrt{Dt}}) \quad (2,15)$$

mit $\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-z^2) dz$, $\operatorname{erf}(x) = 1$ für $x \rightarrow \infty$ als Lösung des RW-Problems.

Integriert man (1,0), d.i.

$$\vec{v}(r,t) = -K \operatorname{grad} p(r,t),$$

an der Stelle $r = r_0$ über die gesamte Fläche C_0 , so ist

$$\vec{V}(r_0,t) = -K \int_{r=r_0} \operatorname{grad} p(r,t) / df \quad (2,16)$$

mit df dem Kugelflächelement $\sin \vartheta d\vartheta d\varphi$ der Gesamtfluß durch C_0 . Mit (2,15) und

$$\operatorname{grad} p(r,t) /_{r=r_0} = \frac{\partial p(r,t)}{\partial r} /_{r=r_0} = p_c \left(\frac{1}{r_0} + \frac{1}{\sqrt{Dt}} \right)$$

für $t > 0$ ist explizit

$$\vec{V}(r_0,t) = -2\pi p_c K r_0 (1 + r_0 / \sqrt{Dt}). \quad (2,17)$$

ii) RW-Problem (A2)

Der Bereich B ist wieder in zwei Teilbereiche B_1 und B_2 getrennt. Sei zunächst wie unter (A2)

$$p(r,t) \equiv p_0 \quad \text{in } B_2.$$

In B_1 sei $p(r,t) \equiv 0$ für $t = 0$.

Das nach (2,3) transformierte RW-Problem lautet dann

$$D_1 \frac{\partial^2 v}{\partial r^2} = \frac{\partial v}{\partial t} \quad (2,18)$$

mit

$$v(r,t) \equiv 0 \quad \text{für } r = r_0, t \geq 0$$

$$v(r,t) \equiv p_0(r_0+d) \quad \text{für } r = r_0+d, t \geq 0$$

$$v(r,t) \equiv 0 \quad \text{für } r \in B_1, t = 0.$$

Die LAPLACEtransformation (2,5) mit (2,6) und (2,7) führt von der partiellen DGL (2,18) im Oberbereich zu der gewöhnlichen DGL

$$\frac{d^2 \bar{v}(r,s)}{dr^2} - q^2 \bar{v}(r,s) = 0 \quad (2,19)$$

im Unterbereich. Dabei ist $q^2 = s/D_1$ und $\mathcal{L}\{v(r,t)\} = 0$ für $t = 0$ laut obiger AB.

Rücktransformation der Lösung von (2,19) in den Oberbereich über (2,8) und Berücksichtigung von (2,3) führt zu

$$p(r,t) = p_0 \frac{r_0+d}{r} \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} \left(\frac{\sinh q(r-r_0)}{\sinh qd} \right) \frac{\exp(\lambda t)}{q} d\lambda, \quad (2,23)$$

der Lösung des RW-Problems. γ ist so zu wählen, daß alle Singularitäten des Integranden links vom Integrationsweg $[\gamma-i\infty, \gamma+i\infty]$ liegen.

Über den Residuensatz der Funktionentheorie [20]

läßt sich (2,23) auf die Form

$$p(r,t) = p_c \frac{r_0+d}{d} (1 - \frac{r}{r_0}) + p_c \frac{2(r_0+d)}{r} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-1}{n}\right)^n \sin \sqrt{n} \frac{r-r_0}{d} \exp(-D_1 \frac{n^2 d^2}{d^2} t) \quad (2,24)$$

[12]bringen.

Tritt der Fall ein, daß in B_2 nur für $t = 0$

$p(r,t) \equiv p_c$ gilt, so sind für B_1 und B_2 getrennt Lösungen zu finden, die bei $r = r_0 + d$ "aneinanderpassen". Die RB und AB für DGL (2,0) lauten dann

$$\left. \begin{aligned} p_1(r,t) &\equiv 0 \text{ für } r = r_0, t \geq 0, \\ p_2(r,t) &\equiv p_c \text{ " } r \rightarrow \infty, t \geq 0, \\ p_1(r,t) &= p_2(r,t) \text{ für } r_0 = r_0 + d, t > 0, \\ \lim_{r \rightarrow (r_0+d)} K_1 \text{grad } p_1(r,t) &= \lim_{r \rightarrow (r_0+d)} K_2 \text{grad } p_2(r,t) \text{ für } t > 0, \\ p_1(r,t) &\equiv 0 \text{ in } B_1 \\ p_2(r,t) &\equiv p_c \text{ in } B_2 \end{aligned} \right\} \text{ für } t = 0.$$

Entsprechend dem vorhergehenden Fall liefert die LAPLACEtransformation bei vorangegangener Transformation (2,3) für B_1 und B_2 je eine gewöhnliche DGL im Unterbereich. Es sind dies die DGLn

$$\frac{d^2 \bar{v}_1(r,s)}{dr^2} - q_1^2 \bar{v}_1(r,s) = 0 \text{ mit } q_1^2 = \frac{s}{D_1} \quad (2,25)$$

und

$$\frac{d^2 \bar{v}_2(r,s)}{dr^2} - q_2^2 \bar{v}_2(r,s) = -\frac{p_c r}{D_2} \text{ mit } q_2^2 = \frac{s}{D_2} \quad (2,26)$$

Als Lösungen dieser DGLn und damit des RW-Problems im Unterbereich ergeben sich über die LAPLACE-transformierten RB

$$\bar{v}_1(r,s) = \frac{p_c K_2}{s} \frac{(1+r_1 q_2) \sinh q_1 (r-r_0)}{K_1 q_1 \cosh q_1 d + (K_2 q_2 + k) \sinh q_1 d}$$

und (2,28)

$$\bar{v}_2(r,s) = \frac{p_c}{s} (r-K_1) \frac{(r_1 q_1 \cosh q_1 d - \sinh q_1 d) \exp(-q_2 (r-r_1))}{K_1 q_1 \cosh q_1 d + (K_2 q_2 + k) \sinh q_1 d}$$

für B_1 und B_2 ; mit $r_1 = r_0 + d$, $k = (K_2 - K_1)/r_1$.

(2,8) transformiert diese unter Berücksichtigung von (2,3) in den Oberbereich. Mit (2,28) ist dann

$$p(r,t) = \begin{cases} p_1(r,t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{r-i\infty}^{r+i\infty} \bar{v}_1(r,\lambda) \exp(\lambda t) d\lambda & \text{in } B_1 \\ p_2(r,t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{r-i\infty}^{r+i\infty} \bar{v}_2(r,\lambda) \exp(\lambda t) d\lambda & \text{in } B_2 \end{cases} \quad (2,29)$$

die Lösung des RW-Problems. r ist wieder so zu wählen, daß alle Singularitäten des Integranden nur links vom Integrationsweg liegen. In beiden Integralen von (2,29) ist der Integrand keine eindeutige Funktion. Er hat bei $\lambda = 0$ einen Verzweigungspunkt. Pole hat er jeweils nur auf der negativen reellen Achse [11]. Schneidet man die λ -Ebene längs der negativen reellen Achse auf, ersetzt den Integrationsweg jeweils durch die geschlossene Kurve gemäß Abb.21, so gilt

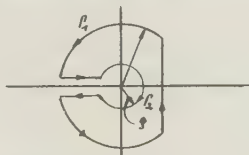


Abb.21: Integrationsweg [11]

$$\int_{r-i\infty}^{r+i\infty} = \lim_{\substack{D, E \rightarrow 0 \\ R, C, F \rightarrow \infty}} \left(\int_C - \int_{C_2} + \int_E - \int_{C_1} \right). \quad (2,30)$$

Nach Substitution von

$$\left. \begin{aligned} \lambda &= D_1 \alpha^2 \exp(-i\pi) & \text{im } 1. \\ \lambda &= \varphi \exp(i\varphi) - r \cdot \varphi \cdot \alpha^2 & 2. \\ \lambda &= D_1 \alpha^2 \exp(i\pi) & \text{" } 3. \end{aligned} \right\} \text{Integral von (2,30)}$$

sowie den zugehörigen Grenzübergängen, folgt als Lösung des RW-Problems, dargestellt als reelles Integral,

$$p(r,t) = \begin{cases} p_1(r,t) = p_0 \left(\frac{r_0+d}{d} \frac{d}{1+d} \left(1 - \frac{r}{r_0} \right) + \right. \\ \quad \left. + \frac{K_1 K_2}{r} \sqrt{\frac{D_1}{D_2}} \frac{2}{\pi} \int_0^\infty F(\alpha, t) \sin \alpha (r-r_0) d\alpha \right) \\ \quad \text{in } B_1 \\ p_2(r,t) = p_0 \left(\left(1 - \frac{1}{1+d} \frac{r}{r_1} \right) + \right. \\ \quad \left. + \frac{K_1}{r_1} \frac{2}{\pi} \int_0^\infty F(\alpha, t) ((K_1 \alpha \cos \alpha d + k \sin \alpha d) \pm \right. \\ \quad \left. \pm \sin \alpha \sqrt{\frac{D_1}{D_2}} (r-r_1) + K_2 \sqrt{\frac{D_1}{D_2}} \sin \alpha d \pm \right. \\ \quad \left. \pm \cos \alpha \sqrt{\frac{D_1}{D_2}} (r-r_1) \right) \frac{d\alpha}{\alpha} \right) \\ \quad \text{in } B_2, \end{cases} \quad (2,31)$$

mit

$$F(\alpha, t) = \frac{(r_1 \alpha \cos \alpha d - \sin \alpha d) \exp(-D_1 \alpha^2 t)}{(K_1 \alpha \cos \alpha d + k \sin \alpha d)^2 + (\alpha K_2 \sqrt{\frac{D_1}{D_2}} \sin \alpha d)^2}.$$

Die Lösung (2,31) setzt voraus, daß

$$\lim_{\substack{d \rightarrow 0 \\ R \rightarrow \infty}} \int_{r_1}^r = 0 \text{ ist.}$$

Dazu wie zum Beweis, daß die Lösung der Form (2,29) die DGl nebst RB und AB erfüllt, vgl. [11].

b) Zylindersymmetrisches RW-Problem

α) Lösungsmethode

Hat C_0 die Gestalt einer ebenen Kreisscheibe, ist eine zylindersymmetrische Lösung der DGL (1,1) zu erwarten. Mit (1,3) nimmt (1,1) die Form

$$D\left(\frac{\partial^2 p}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{\partial^2 p}{\partial z^2}\right) = \frac{\partial p}{\partial t} \quad (2,32)$$

an.

Im stationären Fall separiert (2,32) durch den Ansatz [30]

$$p(r, z) = R(r) \cdot Z(z) \quad (2,33)$$

in die beiden DGLn

$$R''(r) + \frac{1}{r} R'(r) + m^2 R(r) = 0 \quad (2,34)$$

und

$$Z''(z) - m^2 Z(z) = 0 \quad (2,35)$$

mit dem Separationsparameter m^2 .

Für (2,34) ist

$$R(r) = c_1 I_0(mr) + c_2 Y_0(mr), \quad (2,36)$$

für (2,35)

$$Z(z) = c'_1 \exp(mz) + c'_2 \exp(-mz) \quad (2,37)$$

eine Linearkombination linear unabhängiger Lösungen. $I_0(mr)$ und $Y_0(mr)$ sind nullte BESSEL-funktionen erster bzw. zweiter Art.

Aus (2,36) und (2,37) läßt sich über (2,33) und Superposition über alle Teillösungen eine Lösung von (2,32) angeben.

β) Stationäre Verhältnisse

Die Kreisscheibe werde in Zylinderkoordinaten

durch $C_0: \{0 \leq r \leq R_0, z = 0\}$

beschrieben. Unter stationären Bedingungen liegt das RW-Problem

$$\frac{\partial^2 p}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} = 0 \quad (2,38)$$

mit

$$p(r, z) \equiv 0 \quad \text{für } r \leq R_0, z = 0,$$

$$p(r, z) = p_c \quad " \quad r, z \rightarrow \infty \text{ unabhängig voneinander}$$

vor.

Nach dem Produktansatz (2,33) lassen sich aus

(2,36) und (2,37) Teillösungen bilden.

Nach den RB soll die gesuchte Lösung für wachsende r und z endlich bleiben. $Y_0(mr)$ wie $\exp(mz)$ wachsen für r bzw. z gegen ∞ über alle Schranken. Folglich muß

$$c_2 = c_1' = 0 \quad \text{sein.}$$

Die Superposition der Partiallösungen erfolgt nun nicht in Form einer unendlichen Summe, sondern als uneigentliches Integral. Mit $c(m)$ einer zunächst unbekannten Funktion des Superpositionsparameters m , die an die Stelle der Summationskonstanten diskreter Indizes tritt, ist

$$p(r, z) = \int_0^\infty c(\tau) I_0(\tau r) \exp(-\tau z) d\tau. \quad (2,39)$$

$c(\tau)$ ist so zu bestimmen, daß gemäß RB

$$p(r, 0) = \int_0^\infty c(\tau) I_0(\tau r) d\tau = \begin{cases} 0 & \text{für } r \leq R_0 \\ \text{bel. " } & r > R_0 \end{cases} \quad (2,40)$$

jedoch p_c " $r \rightarrow \infty$

erfüllt ist.

Nach [37] gilt für das Integral

$$\int_0^{\infty} \frac{\sin R_0 \tau}{\tau} I_0(\tau r) d\tau = \begin{cases} \pi/2 & \text{für } r \leq R_0 \\ \arcsin R_0/r & \text{für } r > R_0. \end{cases}$$

Mit
$$c(\tau) = \frac{2}{\pi} \frac{\sin(\tau R_0)}{\tau} \quad (2,41)$$

genügt
$$p(r,0) = p_c \left(1 - \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\sin(\tau R_0)}{\tau} I_0(\tau r) d\tau\right)$$

der Forderung (2,40).

Für $z \geq 0$ ist

$$p(r,z) = p_c \left(1 - \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\sin(\tau R_0)}{\tau} I_0(\tau r) \exp(-\tau z) d\tau\right) \quad (2,42)$$

die gesuchte Lösung des RW-Problems;

aus
$$\int_0^{\infty} \frac{\sin(\tau R_0)}{\tau} I_0(\tau r) \exp(-\tau z) d\tau \leq \int_0^{\infty} \frac{\sin(\tau R_0)}{\tau} I_0(\tau r) d\tau =$$

$$= \arcsin \frac{R_0}{r} \quad \text{für } r > R_0 \quad (2,43)$$

und

$$\int_0^{\infty} \frac{\sin(\tau R_0)}{\tau} I_0(\tau r) \exp(-\tau z) d\tau \leq \int_0^{\infty} \exp(-\tau z) d\tau = \frac{1}{z}$$

für $z > 0 \quad (2,44)$

folgt, daß die Lösung (2,42) für $r \rightarrow \infty$ unabhängig von z sowie für $z \rightarrow \infty$ unabhängig von r gegen p_c strebt und damit auch die zweite der RB erfüllt. Für $r, z \gg R_0$ verhält sich die Lösung (2,42) nach (2,43) asymptotisch zu

$$p(r) = p_c \left(1 - \frac{2}{\pi} \frac{R_0}{r}\right). \quad (2,45)$$

Für $\vec{v}(r,z)$ gemäß (1,0) lassen sich mit (2,42) die Komponenten des Stromdichtevektors in r - und z -

Richtung berechnen. Es ist

$$v_z(r, z) = -K \frac{\partial p(r, z)}{\partial z} \\ = -\frac{2}{\pi} p_c K \int_0^{\infty} \sin(\tau R_0) I_0(\tau r) \exp(-\tau z) d\tau \quad (2,48)$$

und

$$v_r(r, z) = \frac{2}{\pi} p_c K \int_0^{\infty} \sin(\tau R_0) I_1(\tau r) \exp(-\tau z) d\tau \quad (2,49)$$

für $z > 0$.

Integration und Differentiation nach z bzw. r durften zur Berechnung von (2,48) und (2,49) vertauscht werden, da für jedes $z > 0$ die uneigentlichen Integrale entsprechend zu (2,44) gleichmäßig konvergieren.

Für $z = 0$ gilt nach [37]

$$\int_0^{\infty} \sin(\tau R_0) I_0(\tau r) d\tau = \begin{cases} 0 & r > R_0 \\ \frac{1}{\sqrt{R_0^2 - r^2}} & r < R_0 \end{cases} \quad (2,50)$$

Speziell ist dann

$$v_z(r, 0) = -\frac{2}{\pi} p_c K \frac{1}{\sqrt{R_0^2 - r^2}} \quad \text{für } r < R_0. \quad (2,51)$$

Integration über C_0 führt zu

$$V = -4p_c K R_0, \quad (2,52)$$

den Gesamtfluß.

γ) Vergleich der Lösung mit der des kugelsymmetrischen RW-Problems

Die Lösung (2,42) für das RW-Problem mit einem zu seiner Flächennormalen rotationssymmetrischen C_0 kann nach (2,45) näherungsweise durch die Lösung des RW-Problems mit kugelsymmetrischem C_0 beschrieben werden. Die Annäherung verbessert sich mit wachsender Entfernung von C_0 . Ist r_0 der Radius der

Halbkugel, R_0 wie bisher der der Kreisscheibe, so muß für die asymptotische Lösung nach (2,45)

$$r_0 = \frac{2}{\pi} R_0 \quad (2,53)$$

gelten.

Vergleicht man den Gesamtfluß jeweils durch C_0 , folgt aus

$$\begin{aligned} V_{HK} &= - 2\pi p_c K r_0 && \text{für } C_0 \text{ als Halbkugel,} \\ V_K &= - 4p_c K R_0 && \text{für } C_0 \text{ als Kreisscheibe} \end{aligned}$$

mit (2,53)

$$V_{HK} = V_K . \quad (2,54)$$

Ersetzt man also im zylindersymmetrischen RW-Problem die Kreisscheibe C_0 durch die Oberfläche einer Halbkugel, so daß der Gesamtfluß jeweils der gleiche bleibt, erhält man die asymptotische Lösung.

Tritt eine flächengleiche Halbkugeloberfläche an die Stelle der Kreisscheibe C_0 , errechnet sich ihr Radius $\bar{r}$ aus

$$\begin{aligned} F_{HK} &= 2\pi \bar{r}_0^2 && \text{für } C_0 \text{ als Halbkugel} \\ F_K &= \pi R_0^2 && \text{für } C_0 \text{ als Kreisscheibe} \end{aligned}$$

und der Forderung $F_{HK} = F_K$
zu $\bar{r} = \sqrt{2} R_0 .$

Im Unterschied zu (2,45) ergibt sich daraus

$$p_c (1 - \sqrt{2} \frac{R_0}{\bar{r}}) . \quad (2,55)$$

Für große r zeigt (2,55) zwar ähnliches Verhalten wie die asymptotische Lösung (2,45), nähert sich jedoch um den Faktor $\sqrt{2}/2$ langsamer dem Wert p_c .

c) RW-Problem in kartesischen Koordinaten

α) Lösungsmethode

Läßt die Gestalt von C_0 trotz passender Darstellung des LAPLACEoperators Δ eine exakte Lösung der DGL (1,1) nicht zu, wird (1,1) durch eine Differenzengleichung ersetzt und nach dieser eine auf einer endlichen Punktmenge definierte Näherungsfunktion berechnet. Der unbeschränkte Bereich B muß dazu durch einen beschränkten B' ersetzt werden. Die Gitterpunkte eines in B' aufgespannten Raumgitters $\mathcal{N}$ bestimmter Maschenweite bilden den Definitionsbereich der Näherungsfunktion. Eine solche läßt sich für jede Maschenweite definieren. Von der Maschenweite hängt folglich auch ihre Abweichung gegenüber der exakten Lösung der DGL ab. Abschätzen läßt sich diese Abweichung nur unter speziellen Voraussetzungen. Allgemein sind Ableitungen der exakten Lösung erforderlich.

1) Differentialgleichung - Algebraisches Problem

Sie C_0 die Fläche $\{|x| \leq R, |y| \leq R, z = 0\}$. Mit (1,4) hat die von t unabhängige DGL (1,1), die

LAPLACEsche DGL, die Gestalt

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} = 0 ; \quad (2,56)$$

$p(x,y,z)$ sei ihre (exakte) Lösung.

Zur näherungsweisen Lösung von (2,56) tritt an die Stelle des unbeschränkten Bereiches B der beschränkte

$$B' : \{ |x| \leq N, |y| \leq N, |z| \leq N \} .$$

Der Mantel dieses Würfels sei der Rand C_1 . Es sei

$$\varphi(C_1) = p(C_1)$$

Nach dem Übergang von B zu B' bzw. von dem RW-Problem

$$\Delta p = 0 \text{ in } B$$

$$\text{mit } p(C_0) \equiv 0$$

$$p(C_\infty) \equiv p_c$$

zum RW-Problem

$$\Delta \hat{p} = 0 \text{ in } B'$$

$$\text{mit } \hat{p}(C_0) \equiv 0$$

$$\hat{p}(C_1) = \varphi(C_1)$$

sei p die Lösung in B, $\hat{p}$ die in B'.

Da die Lösung der LAPLACEschen DGL ihr Maximum wie ihr Minimum nicht im Inneren von B bzw. B' annimmt (Maximumprinzip [8], [18], [33], [47]), folgt

$$p(x,y,z) \equiv \hat{p}(x,y,z) \text{ für } (x,y,z) \in B'.$$

Denn die Differenz $p - \hat{p}$ genügt der LAPLACEschen DGL bei identisch verschwindenden RB auf C_0 und C_1 .

Daraus folgt unmittelbar die Identität von p und $\hat{p}$ in B' . $\varphi(C_1)$ sei vorerst als bekannt vorausgesetzt. In B' wird parallel zu den Koordinatenachsen ein Raumgitter Γ der Maschenweite h aufgespannt. h ist dabei so festgelegt, daß bei gegebenem R

$$h \cdot \mu = R, \quad (2,57)$$

ferner $N = \varphi \cdot R$;

also $N = \nu \cdot h$

gilt.

φ und μ sind dabei so zu wählen, daß

$$\nu = \varphi \cdot \mu$$

eine natürliche Zahl ist.

Die Faktoren μ und φ bestimmen die Feinheit bzw. die Ausdehnung des Raumgitters Γ . Sie beeinflussen die Abweichung der Näherungslösung von der exakten Lösung. Sie seien zunächst fest gewählt, womit h und N festliegen. Die Gitterpunkte von B' stellen sich somit dar als

$$(x,y,z) = (kh,ih,jh) \text{ mit } k,i,j = 0, \pm 1, \pm 2 \dots \pm \nu.$$

Sie werden im weiteren durch $(x,y,z) \in B' \cap \Gamma$ gekennzeichnet. Alle Gitterpunkte, die nicht auf C_0 bzw. C_1 liegen, heißen "innere" Punkte, anderenfalls "Randpunkte".

Um zu einer auf $B' \cap \Gamma$ definierten Näherungsfunktion $P(x,y,z)$ zu gelangen, wird der LAPLACEoperator für alle "inneren" Punkte durch einen von h abhän-

gigen Differenzenoperator Δ_h ersetzt (u.a. [3], [7], [9], [10], [15], [27], [28], [36], [38], [46], [48]).

Formal ergibt sich damit die der Differentialgleichung $\Delta_p(x,y,z) = 0$ analoge Differenzengleichung

$$\Delta_h P(x,y,z) = 0 \quad (2,58)$$

mit

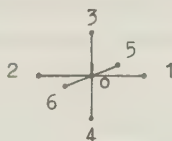
$$\Delta_h P = \frac{P(x+h,y,z)+P(x-h,y,z)+P(x,y+h,z)+P(x,y-h,z)}{h^2} + \frac{P(x,y,z+h)+P(x,y,z-h) - 6P(x,y,z)}{h^2}.$$

Da (2,58) homogen ist, kann die Differenzengleichung auch in der Form

$$P(x,y,z) = 1/6 \{ P(x+h,y,z) + P(x-h,y,z) + P(x,y+h,z) + P(x,y-h,z) + P(x,y,z+h) + P(x,y,z-h) \} \quad (2,59)$$

geschrieben werden.

Der Differenzenoperator Δ_h läßt sich durch das Schema [46]



$$(2,60)$$

mit der Anweisung gemäß (2,58)

$$P_0 = 1/6 \sum_{i=1}^6 P_i \quad (2,61)$$

bzw.

$$0 = \sum_{i=1}^6 P_i - 6P_0$$

veranschaulichen. Die Punkte $i = 1$ bis 6 sind von 0 um h entfernt.

Das dem RW-Problem für die LAPLACEsche DGL analoge Differenzen-RW-Problem zur Berechnung einer Näherungslösung lautet dann

$$\begin{aligned} \Delta_h P(x,y,z) &= 0 \text{ falls } (x,y,z) \in I(B') \cap I' \\ \text{mit } P(x,y,z) &= 0 \quad " \quad (x,y,z) \in C_0 \cap I' \quad (2,62) \\ P(x,y,z) &= \varphi(x,y,z) \quad (x,y,z) \in C_1 \cap I' \end{aligned}$$

$I(B')$ bezeichnet dabei das Innere von B' .

(2,62) ist ein lineares Gleichungssystem mit ebenso vielen Gleichungen wie Unbekannten. Damit ist - zunächst rein formal - das Auffinden einer Näherungslösung des RW-Problems für die LAPLACEsche DGL auf ein rein algebraisches Problem zurückgeführt.

- 1) Näherungslösung - Existenz, Eindeutigkeit
Konvergenz bei Verkleinerung der Maschenweite h

Die Auflösung des Gleichungssystems (2,62) kann im Hinblick auf den entstehenden Rechenaufwand nur bei wenigen Unbekannten, d.h. bei kleiner Gitterpunktzahl über die üblichen Determinantenoperationen geschehen. Bei großer Gitterpunktzahl bleibt nur die Möglichkeit, die Lösung des Gleichungssystems iterativ zu berechnen. Ein Verfahren dieser Art ist das in der Literatur vielfach beschriebene Relaxationsverfahren (u.a. [3], [15], [45], [48], [55]).

Dieses geht von beliebigen Ausgangswerten $P^0(x,y,z)$ an den "inneren" Punkten von $B' \cap I'$ aus. Für jeden

dieser Punkte wird unter Beachtung der vorgeschriebenen RW an den "Randpunkten" das "Residuum"

$RS(x,y,z)$ berechnet. In Anlehnung an (2,59) ist das "Residuum" definiert als

$$RS(x,y,z) = P(x+h,y,z)+P(x-h,y,z)+P(x,y+h,z)+P(x,y-h,z)+P(x,y,z+h)+P(x,y,z-h)-6P(x,y,z).$$

(2,63)

Nach (2,61) ist für die Ausgangswerte P_0^0

$$RS_0^0 = \sum_{i=1}^6 P_i^0 - 6P_0^0.$$

Ist für ein $(x,y,z) \in I(B') \wedge$ das Residuum $RS_0^0 \neq 0$, wird zu seinem P-Wert $1/6 \cdot RS_0^0$ hinzuaddiert und der so gefundene neue P-Wert anstelle des alten an der betrachteten Stelle eingetragen. Die P-Werte des 1. Iterationsschrittes an den "inneren" Punkten von $B' \wedge$ ergeben sich so aus

$$P_0^1 = P_0^0 + \frac{RS_0^0}{6}.$$

(2,64)

Allgemein ist für jedes $n \geq 1$ im n-ten Iterationsschritt

$$RS_0^{n-1} = \sum_{i=1}^6 P_i^{n-1} - 6P_0^{n-1}$$

$$P_0^n = P_0^{n-1} + \frac{RS_0^{n-1}}{6}.$$

(2,65)

Obwohl die Korrektur des Näherungswertes an einem "inneren" Gitterpunkt bewirkt, daß das schon Null gewordene Residuum eines nicht zu den "Randpunkten" gehörenden Nachbarpunktes wieder ungleich Null wird,

läßt sich zeigen ([1],[2],[7],[14],[24],[27],[43],[45],[48],[61]), daß dieser Korrekturprozeß in Einzelschritten der Lösung des Gleichungssystems (2,62) zustrebt. Es ist

$\lim_{n \rightarrow \infty} P_0^n = P$ für jeden "inneren" Punkt von $B' \cap \Gamma'$
bzw. in der anderen Schreibweise

$\lim_{n \rightarrow \infty} P^n(x,y,z) = P(x,y,z)$ für alle $(x,y,z) \in I(B' \cap \Gamma')$
und das gewählte h .

Die Abweichung der P-Werte nach dem n-ten Iterationsschritt von der Lösung des Gleichungssystems (2,62) läßt sich für das Relaxationsverfahren abschätzen. Es gilt [15],[48]

$$|P_0^n - P| = \frac{1}{6} \left(\frac{D}{2}\right)^2 \frac{\max |RS_0^{n-1}|}{h^2} \quad (2,66)$$

für alle "inneren" Punkte von $B' \cap \Gamma'$, wobei D der Durchmesser der Kugel ist, die alle "inneren" Punkte von $B' \cap \Gamma'$ enthält. Dieser Fehlerabschätzung muß sonderlich für kleine h Beachtung geschenkt werden.

Die Lösung des Gleichungssystems (2,62), der der Relaxationsprozeß zustrebt, existiert für jede Maschenweite h und ist eindeutig. Dies folgt aus dem Fundamentalsatz der Theorie der linearen Gleichungen [14],[17],[28]. Darüberhinaus ergibt sich auf diesem Wege auch unmittelbar die Existenz und Eindeutigkeit der Lösung des RW-Problems für die DGL (2,56) [17].

Weiter läßt sich zeigen [9],[14],[28], daß die Lösung des Gleichungssystems, d.i. die Näherungslösung P , im Bezug auf die exakte Lösung p proportional zum Quadrat der Maschenweite mit $h \rightarrow 0$ gegen diese konvergiert, also

$$|P - p| = c \cdot h^2 .$$

c ist eine von h unabhängige Konstante, und von p ist vorausgesetzt, daß seine Ableitungen bis zur 4. Ordnung existieren.

Zusammenfassend läßt sich der Satz formulieren:

Löst man anstelle des RW-Problems für die LAPLACEsche DGL

$$\Delta p(x,y,z) = 0, (x,y,z) \in B$$

mit

$$p(C_0) \equiv 0$$

$$p(C_\infty) \equiv p_c,$$

das analoge Differenzen-RW-Problem

$$\Delta_h P(x,y,z) = 0 \quad (x,y,z) \in B' \cap \mathcal{I}'$$

mit

$$P(C_0 \cap \mathcal{I}') = 0$$

$$P(C_1 \cap \mathcal{I}') = p(C_1 \cap \mathcal{I}'),$$

für ein Raumgitter $\mathcal{I}'$ der Maschenweite h , so folgt:

1. Das Differenzen-RW-Problem hat für jedes h stets eine eindeutige Lösung;
2. Falls die exakte Lösung beschränkte Ableitungen bis zur vierten Ordnung hat, strebt in B' die Differenz zwischen exakter und näherungsweise Lösung proportional zu h^2 gegen Null. Der Proportionalitätsfaktor c ist von h unabhängig.

iii) Fehlerabschätzung

Obwohl es feststeht, daß die Näherungslösung für $h \rightarrow 0$ gegen die exakte Lösung konvergiert, läßt sich aus den Überlegungen, die zu obigem Satz führen, nichts über die Größe der Abweichung beider Lösungen voneinander aussagen. Für eine Fehlerabschätzung auf diesem Wege sind Ableitungen der exakten Lösung nötig. Die Ableitungen stehen jedoch im allgemeinen ebensowenig zur Verfügung wie die exakte Lösung selbst. Sie müßten durch zusätzliche Näherungsrechnungen aus der Näherungslösung gewonnen werden [15],[28],[36].

Für technische Probleme begnügt man sich häufig mit Näherungslösungen ohne Fehlerbetrachtung [5],[22],[54]. Anderenorts in der Literatur [4],[25],[26],[31] werden solche RW-Probleme herausgegriffen, die neben einer Näherungslösung auch die exakte anzugeben gestatten. Anstatt Maxima gewisser Ableitungen der exakten Lösung zu berechnen oder abzuschätzen, geht [58] zu statistischen Aussagen über ähnliche RW-Probleme über und gelangt zu einer Fehlerabschätzung.

Speziell für einen rechteckigen Bereich gibt [39] unter Voraussetzung gewisser Ableitungen der Randfunktion eine Fehlerabschätzung in Abhängigkeit von h^2 an. Eine weitere Möglichkeit zur Fehlerabschätzung in speziellen Fällen ist in [50],[51] be-

geschrieben. Sie folgt aus dem Übergang von der Differentialgleichung zu einer Differentialungleichung bei Verwendung der GREENschen Funktion.

Kennt man eine Näherungslösung des RW-Problems der LAPLACEschen DGl in dem Sinn, daß sie wohl der DGl genügt, nicht aber den vorgeschriebenen RB, ist allgemein eine Fehlerabschätzung für die 1. RW-Aufgabe möglich [16]. Die Fehlerfunktion, d.h. die Abweichung dieser Näherungsfunktion von der gesuchten, ist dann durch das Maximum und Minimum, das sie auf dem Rand annimmt, beschränkt. Diese Abschätzung - wie auch die beiden vorhergenannten - trifft jedoch nicht unmittelbar das Ziel, die Abweichung einer Näherungslösung als Lösung des Differenzen-RW-Problems von der exakten abzuschätzen.

Die Fehlerabschätzung, die hier verwendet wird, geschieht mit Hilfe zweier exakter Lösungen des gegebenen RW-Problems bei veränderter Form von C_0 . Zu dem Zweck wird C_0 durch seinen Umkreis und seinen Inkreis begrenzt. Für den Rand

$$C_1: \{0 \leq r \leq RI, z = 0\}$$

bzw. $C_a: \{0 \leq r \leq RA, z = 0\}$

mit $RI = R$ und $RA = \sqrt{2} R$

ist das RW-Problem

$$\Delta p(x, y, z) = 0$$

mit $p(C_1) \equiv 0$ bzw. $p(C_a) \equiv 0$

$$p(C_\infty) \equiv p_c \quad p(C_\infty) \equiv p_c$$

gemäß III2b exakt lösbar. p_1 bzw. p_a sei jeweils die Lösung, B_1 bzw. B_a der zugehörige Bereich.

Da p_c stets positiv sein soll, folgt aus den RB und dem Maximumprinzip

$$p_1 > 0 \text{ in } I(B_1) \text{ bzw. } p_a > 0 \text{ in } I(B_a).$$

Ebenso gilt für die unbekannte Lösung p des RW-Problems mit

$$p(C_0) \equiv 0 \text{ und } p(C_\infty) \equiv p_c$$

die Beziehung

$$p > 0 \text{ in } I(B).$$

Wegen der Linearität des LAPLACEoperators gilt für die Differenz

$$\mathcal{J}p = p_1 - p$$

das RW-Problem

$$\Delta(\mathcal{J}p) = 0$$

mit

$$\begin{aligned} \mathcal{J}p &\equiv 0 && \text{für } C_\infty \\ \mathcal{J}p &\equiv 0 && \text{" } C_0 \cap C_1 \\ \mathcal{J}p &\equiv p_1 && \text{" } \mathcal{C}(C_1) \cap C_0; \end{aligned}$$

dabei bedeutet $\mathcal{C}(C_1)$ das Komplement von C_1 .

Wegen $p_1 > 0$ in $\mathcal{C}(C_1) \cap C_0$ und des Maximumprinzips gilt

$$\mathcal{J}p > 0 \text{ in } I(B),$$

daher

$$p_1 > p.$$

Ebenso folgt

$$p > p_a \text{ in } I(B);$$

also ist

$$p_a < p < p_1 \text{ in } I(B). \quad (2,67)$$

Insbesondere gilt (2,67) auch in $I(B')$ und auf C_1 .

Zur Abschätzung der Abweichung $|P^n - p|$, also der zu jedem h und dem von h abhängigen Iterationsschritt n gehörenden Näherungslösung P^n von der exakten p in B' , wird die Hilfsfunktion

$$\bar{p} = (p_i + p_a)/2 \quad (2,68)$$

gebildet.

Es ist dann

$$|P^n - p| \leq |P^n - \bar{p}| + |\bar{p} - p| \quad \text{in } B'. \quad (2,69)$$

Der zweite Summand von (2,69) ist wegen der unbekannten exakten Lösung nicht unmittelbar bestimmbar. Nun ist aber

$$|\bar{p} - p| = |p - \bar{p}| = \lim_{h \rightarrow 0} |P - \bar{p}| \leq \lim_{h \rightarrow 0} \text{Max} |P - P^n| + \\ + \lim_{h \rightarrow 0} \text{Max} |P^n - \bar{p}|,$$

da die zu jedem h gehörende Lösung des Differenzenproblems P mit $h \rightarrow 0$ gegen p strebt. Der erste Summand auf der rechten Seite der Abschätzung läßt sich für jedes h und das zugehörige n nach (2,66) abschätzen, der zweite aus dem Verhalten von $\text{Max} |P^n - \bar{p}|$ für $h \rightarrow 0$ numerisch ermitteln. Als Abschätzung resultiert somit für ein bestimmtes h

$$|P^n - p| \leq \text{Max} |P^n - \bar{p}| + \frac{1}{6} \left(\frac{D}{2} \right)^2 \frac{\text{Max} |RS_0^{n-1}|}{h^2} + \lim_{h \rightarrow 0} \text{Max} |P^n - \bar{p}|. \quad (2,70)$$

Unabhängig von der Maschenweite h gilt nach (2,67) und (2,68) außerdem die Abschätzung

$$|P^n - p| \leq \text{Max} |P^n - \bar{p}| + \text{Max}(p_i - p_a)/2 \quad (2,70a)$$

für ein bestimmtes, von h unabhängiges n .

Die Abschätzung (2,70) setzt voraus, daß gemäß

$$\varphi(C_1) = p(C_1)$$

die exakte Lösung auf dem Rand C_1 bekannt ist. Im vorliegenden RW-Problem für B' ist das nicht der

Fall. Es wird daher $\varphi(C_1)$ durch

$$\bar{p}(C_1) = \frac{p_a(C_1) + p_1(C_1)}{2} \quad (2,71)$$

ersetzt. Ist dann $\tilde{p}$ die exakte Lösung des RW-Prob-

$$\begin{aligned} \text{lems} & \quad \Delta \tilde{p} = 0 \\ \text{mit} & \quad \tilde{p}(C_0) \equiv 0 \\ \text{und} & \quad \tilde{p}(C_1) \equiv \bar{p}(C_1), \end{aligned}$$

p wie bisher die des RW-Problems

$$\begin{aligned} & \quad \Delta p = 0 \\ \text{mit} & \quad p(C_0) \equiv 0 \\ \text{und} & \quad p(C_1) \equiv \varphi(C_1) \text{ bei unbekanntem } \varphi, \end{aligned}$$

so gilt wegen

$$\tilde{p}(C_0) \equiv p(C_0)$$

und des Maximumprinzips

$$|\tilde{p} - p| \leq \sigma_0,$$

$$\text{mit} \quad \sigma_0 = \frac{1}{2} \text{Max}(p_1(C_1) - p_a(C_1)) \text{ in } B'. \quad (2,72)$$

Dieser Fehler kommt durch die angenäherten RB auf C_1 , letztenendes durch den Übergang vom unbeschränkten Bereich B zum beschränkten B' , in (2,70) hinzu. Damit gilt in B' schließlich die Abschätzung

$$\begin{aligned} |P^n - p| & \leq |P^n - \bar{p}| + |\bar{p} - \tilde{p}| + |\tilde{p} - p| \\ & \leq \text{Max}|P^n - \bar{p}| + \frac{1}{6} \left(\frac{D}{2} \right)^2 \frac{\text{Max}|RS^{n-1}|_0}{h^2} + \lim_{h \rightarrow 0} \text{Max}|P^n - \bar{p}| + \sigma_0 \end{aligned} \quad (2,73)$$

In diesem Fall strebt P für $h \rightarrow 0$ gegen $\tilde{p}$.

Die Abschätzung (2,70) bzw. (2,73) eignet sich besonders für den Teilbereich B'_1 von B' , in dem sich die gesuchte Lösung p von der Hilfsfunktion $\bar{p}$ nur wenig unterscheidet. Das ist wegen (2,67) und des asymptotischen Verhaltens von p_a und p_1

für wachsende Entfernung von C_0 (vgl. 2b) der Fall. Für die Anwendung auf das praktisch vorliegende Problem interessiert nun gerade ein solcher Teilbereich, nämlich derjenige, bis zu dessen Rand die jeweilige Näherungslösung einen bestimmten Prozentwert von p_c erreicht hat. Für diesen "Einzugsbereich" wird die angegebene Fehlerabschätzung herangezogen.

Um auch für den gesamten Bereich B' eine orientierende Fehlerangabe zu haben, kann die vielfach in der Praxis verwandte Fehlerabschätzung nach RUNGE dienen. Danach ist [46]

$$\epsilon_{2h}(x,y,z) \approx \frac{P_h(x,y,z) - P_{2h}(x,y,z)}{2^n - 1}, \quad (2,74)$$

wobei P_h und P_{2h} die Näherungswerte im Punkte $(x,y,z) \in B' \cap \Gamma$ bei einer Maschenweite h bzw. $2h$ sind. n ist die Ordnung, mit der P bei Verkleinerung von h gegen p strebt. Nach dem Satz in (2c, ∞ , i) ist $n = 2$, folglich

$$\epsilon_{2h} \approx \frac{P_h - P_{2h}}{3}. \quad (2,75)$$

3) Zur Durchführung der Näherungsmethode

Aus Symmetriegründen braucht eine Näherungslösung des Differenzen-RW-Problems gemäß (2,62)

$$\begin{aligned} \Delta_h P(x,y,z) &= 0 \text{ mit } (x,y,z) \in B' \cap \Gamma \\ \text{mit } P(C_0 \cap \Gamma) &= 0, \\ P(C_1 \cap \Gamma) &= \bar{p}(C_1 \cap \Gamma) \end{aligned}$$

und $C_0: \{x_1 \leq R, y_1 \leq R, z = 0\}$ nur für einen Teilbereich von B' berechnet zu werden. Ist in $B'' \cap \Gamma$ mit

$$B'': \{0 \leq x \leq y, 0 \leq y \leq N, 0 \leq z \leq N\}$$

die Näherungslösung zum gewählten Gitterpunktabstand h bekannt, ergibt sich die für den gesamten Bereich B' aus dieser durch Spiegelung. An den B'' begrenzenden Symmetrieebenen sind stets mindestens zwei P-Werte im Schema (2,60) gleich. So hat z.B. das Schema für alle "inneren" Punkte der Symmetrieebene $x = 0$ die Gestalt

$$\begin{array}{c} 3 \\ | \\ 1 \text{---} 0 \text{---} 5 \\ | \\ 4 \end{array} \quad = \quad \begin{array}{c} 3 \\ | \\ 1 \text{---} 0 \text{---} 5 \\ | \\ 4 \end{array} 1(2\#)$$

Im Relaxationsprozeß gemäß (2,65) zur Ermittlung der h - abhängigen Näherungslösung P_0^n ist für jeden "inneren" Punkt aus $B' \setminus \Gamma$ und jedes $n \geq 1$

$$\text{Max DP}^n = \text{Max} |P_0^n - P_0^{n-1}| = \text{Max} \left| \frac{RS_0^{n-1}}{6} \right|$$

die Kontrollgröße. Unterschreitet Max DP^n für ein $n = n(h)$ ein vorgegebenes $\epsilon_{DP} > 0$, wird der Iterationsprozeß abgebrochen. Die Abbruchschranke für das jeweilige h wird nach (2,66) festgelegt. Danach ist mit $N = \nu \cdot h$ und $D/2 = \sqrt{3} \frac{N}{2}$ für B''

$$|P_0^n - P| \leq \frac{3}{4} \nu^2 \text{Max} \left| \frac{RS_0^{n-1}}{6} \right|. \quad (2,76)$$

Da die Abweichung $|P^n - P|$ für jedes h und damit ν die gleiche sein soll, muß die Abbruchschranke entsprechend gewählt werden.

Um die Abbruchschranke jeweils nach wenigen Itera-

tionsschritten zu unterschreiten, geht man von Ausgangswerten P^0 aus, die möglichst wenig von der Näherungslösung P abweichen. Sind sie im Idealfall mit der Lösung des Differenzenproblems für das gewählte h in $B^{\wedge \prime}$ identisch, sind sofort alle $RS^0 = 0$.

7) Berechnung der RW auf C_1 und der Ausgangswerte

Die RW für C_1 , also $P(C_1 \wedge \prime) = \varphi(C_1 \wedge \prime)$

mit

$$\varphi(C_1 \wedge \prime) = \bar{p}(C_1 \wedge \prime) = \frac{p_1(C_1 \wedge \prime) + p_a(C_1 \wedge \prime)}{2}$$

werden über (2,42) mit $R_0 = RI$ bzw. $R_0 = RA$ berechnet. Danach ist

$$\varphi(r, z) = p_c \left(1 - \frac{1}{\tau} \int_0^{\infty} \frac{\sin(\tau RI) + \sin(\tau RA)}{\tau} I_0(\tau r) \exp(-\tau z) d\tau \right) \quad (2,77)$$

$$\text{mit } (r, z) \in C_1 \wedge \prime \text{ und } r = \sqrt{x^2 + y^2}.$$

Das Integral wird numerisch ausgewertet.

Mit $\alpha > 0$ und $G(\tau; r, z)$, dem Integrand von (2,77), ist

$$\varphi(r, z) = p_c - \frac{p_c}{\kappa} \int_0^{\infty} G(\tau; r, z) d\tau = \frac{p_c}{\kappa} \int_{\alpha}^{\infty} G(\tau; r, z) d\tau \quad (2,78)$$

Der letzte Summand in (2,78), bezeichnet mit $R(r, z)$, läßt sich durch

$$R(r, z) \leq p_c \frac{2}{\kappa} \int_{\alpha}^{\infty} \frac{\exp(-\tau z)}{\tau} d\tau = - p_c \frac{2}{\kappa} Ei(-\alpha z) \quad (2,79)$$

mit $Ei(-\alpha z)$ der Integralexponentiellen [34] abschätzen.

Nach Wahl eines festen $\beta > 0$ gilt über

$$z \alpha = \beta \quad \text{bzw.} \quad \alpha = \frac{\beta}{z}$$

$$R(r, z) \leq - \frac{2}{\kappa} Ei(-\beta) p_c. \quad (2,80)$$

Bei der Ausführung der Berechnung liegt ein $\beta = 5$ zugrunde. Daraus folgt

$$R(r, z) \leq 0.75 \cdot 10^{-3} p_c. \quad (2,81)$$

Das Integral

$$\frac{p_c}{k} \int_0^{\infty} G(\tau; r, z) d\tau$$

wird über das Integrationsverfahren nach ROMBERG [59], einer verbesserten Trapezmethode, berechnet. Dazu ist zunächst die Kenntnis von $I_0(\tau r)$ für den Bereich

$$0 \leq \tau r \leq \sqrt{2} N$$

erforderlich. Dieser Bereich ergibt sich aus

$$0 \leq x \leq N, \quad 0 \leq y \leq N$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}$$

und

$$0 \leq \tau \leq \infty.$$

Für $\tau r \leq 8$ gilt nach TSCHEBYSCHEFF folgende Approximation für die nullte BESSELFunktion:

$$I_0(\tau r) = \sum_{\mu=0}^9 a_{\mu} \left(\frac{\tau r}{8}\right)^{2/\mu} + \varepsilon_1(\tau r) \quad (2,82)$$

mit $\varepsilon_1(\tau r) < 10^{-7}$ und Koeffizienten a_{μ} , gegeben in [60].

Für $\tau r > 8$ gilt über die HANKELschen asymptotischen Reihen [34]

$$I_0(\tau r) = \sqrt{\frac{2}{\pi \tau r}} \left(\cos\left(\tau r - \frac{\pi}{4}\right) P_0^*(\tau r) - \sin\left(\tau r - \frac{\pi}{4}\right) Q_0(\tau r) \right) + \varepsilon_2(\tau r) \quad (2,83)$$

$$\text{mit } P_0^*(\tau r) = 1 - \frac{(0,2)}{(2\tau r)^2} + \frac{(0,4)}{(2\tau r)^4} - \dots$$

$$Q_0(\tau r) = \frac{(0,1)}{(2\tau r)} - \frac{(0,3)}{(2\tau r)^3} + \dots$$

$$(0,0) = 1; \quad (0,m) = \frac{(-1^2)(-3^2)\dots(-(2m-1)^2)}{2^{2m}m!}, m=1,2,\dots$$

Der Fehler $\varepsilon_2(\tau r)$ ist dabei dem Betrage nach kleiner als das erste beim Abbrechen der asymptotischen Reihen vernachlässigte Glied. Bei Abbruch nach $m = 4$ ist

$$\varepsilon_2(\tau r) = \sqrt{\frac{2}{\tau \tau r}} \sin\left(\tau r - \frac{\pi}{4}\right) \frac{(0,5)}{(2\tau r)^5}.$$

Wegen $r > 8$ folgt

$$\varepsilon_2(\tau r) < 1.5 \cdot 10^{-6}. \quad (2,84)$$

Nachdem feststeht, wie $I_0(\tau r)$ berechnet werden kann, wird das Integrationsintervall $[0, \infty]$ so oft unterteilt, daß die ROMBERG-Integrationsmethode in jedem Teilintervall die Abbruchschranke ε'_3 unterschreitet. Im Hinblick auf den Rechenaufwand wurde $\varepsilon'_3 = 10^{-5}$ gewählt. Danach ist bei maximal 50 Intervallteilen, die für großes r und kleines z erforderlich sind, das Integral über $G(\tau; r, z)$ von 0 bis ∞ bis auf einen Fehler

$$\varepsilon_3 = \frac{p}{k} c \cdot 50 \cdot \varepsilon'_3 = 1.5 p_c \cdot 10^{-4}$$

berechnet.

Mit (2,78) und (2,81) ist dann

$$|\varphi(r, z) - \varphi^*(r, z)| \leq \varepsilon_3 + R(r, z) = 0.9 \cdot 10^{-3} p_c \quad (2,85)$$

mit

$$\varphi^*(r, z) = p_c \left(1 - \frac{1}{k} \int_0^{\infty} G(\tau; r, z) d\tau\right). \quad (2,86)$$

Neben den RW auf $C_1 \cap \Gamma$ werden über $\varphi^*(r, z)$ auch die Ausgangswerte P^0 für alle "inneren" Punkte von $B \cap \Gamma$ berechnet.

Für $\mu = 1, 2$ und 4 , $\vartheta = 8$, also $N = 8h, 16h$ und $32h$

wurde jeweils die zugehörige Näherungslösung ermittelt. Der Berechnung lagen die ALGOL-Programme vom Anhang A0 zugrunde.

d) Fehlerbetrachtung (*)

Die Abweichung der in Abhängigkeit von h nach dem Relaxationsverfahren berechneten Näherungslösung P^n von der exakten Lösung p des RW-Problems kann über (2,70) abgeschätzt werden. Zunächst sei vorausgesetzt, auf C_1 unterscheide sich die Hilfsfunktion $\bar{p}$ von p vernachlässigbar wenig.

Aus Tabelle IV und Abb.23 ist

$$\epsilon_{\max} = \max |P^n - \bar{p}|$$

für gewisse Teilbereiche von B' in Abhängigkeit von h zu entnehmen.

Tabelle IV:

h	$\epsilon_{\max}$ für $P^n \approx$						
	90	85	80	75	70	65	60
R	0.501	1.761	3.089	4.567	5.772	7.496	8.658
R/2	0.275	0.858	1.563	2.249	3.035	3.682	4.591
R/4	0.095	0.309	0.532	0.796	1.154	1.625	2.127

Aus dem monotonen Verhalten der Kurve (1) in Abb.22 für $h \rightarrow 0$ ergibt sich - insbesondere für den Rand des "Einzugsbereiches" -

$$\lim_{h \rightarrow 0} \epsilon_{\max} = \lim_{h \rightarrow 0} |P^n - \bar{p}| \leq 0.1 .$$

(*) Alle Zahlenangaben sind in % von p_c zu verstehen.

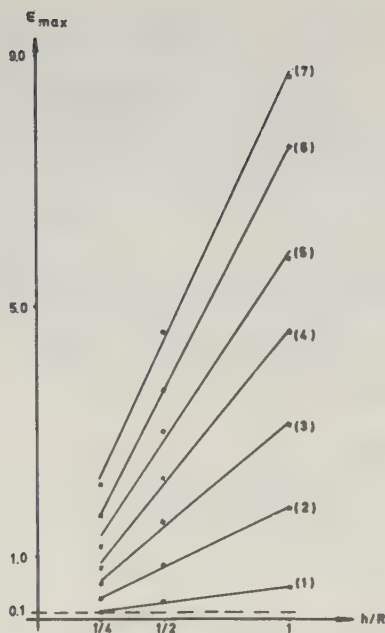


Abb. 22: $\epsilon_{\max}$, die Abweichung der Näherungslösung P^n von der Hilfsfunktion $\bar{p}$, in Abhängigkeit von der Maschenweite h für $P^n \geq 90,85 \dots 60$ (Kurven (1) ... (7)).

Dazu läßt sich durch zyklische Iteration des Relaxationsprozesses die Abweichung der P^n von der Lösung P des Differenzen-RW-Problems gemäß (2,66) und (2,76) auf

$$\text{Max}|P - P^n| \leq 0.09$$

beschränken. Tabelle V zeigt die Kontrollgröße ϵ_{DP} gemäß S.86 und die Anzahl n der erforderlichen Iterationszyklen für die jeweils gewählte Maschenweite h .

Tabelle V:

h	ϵ_{DP}	n(h)	$ P - P^n $	benötigte Zeit d. IBM 7094 in Min.
R	0.00204	93	} ≤ 0.09	1.52
R/2	0.00052	306		16.05
R/4	0.00012	876		327.21

Berücksichtigt man schließlich, daß die RW $\bar{p}(C_1 \cap \dots)$ gemäß (2,85) bis auf einen Fehler $\leq 0.9 \cdot 10^{-1}$ genau bestimmt sind, gilt nach (2,70)

$$|P^n - p| \leq \epsilon_{\max} + 0.28 ,$$

wobei $\epsilon_{\max}$ aus der Tabelle IV bzw. Abb.22 zu entnehmen ist. In Tabelle VI ist für (1) und damit für den Rand des "Einzugsbereiches" die Abweichung der Näherungslösung P^n von der exakten p für die gewählten h zusammengestellt. (*)

Tabelle VI:

h	$ P^n - p $
R	< 0.79
R/2	< 0.56
R/4	< 0.38

Führt man gemäß (2,70a) die Fehlerabschätzung durch, läßt sich (unabhängig von h) eine Schranke von 3 bis 4 angeben. Diese Fehlerabschätzung ist größer als die oben beschriebene.

Die bisher gemachte Voraussetzung über die Übereinstimmung von $\bar{p}$ und p auf C_1 kann durch die - wenn auch grobe - Abschätzung gemäß (2,72) um-

(*) Entsprechend zu (1) können die Kurven (2)...(7) zu einer Fehlerbetrachtung herangezogen werden.

gangen werden. Mit (2,42) für p_a und p_i ist

$$\sigma_0 \leq \frac{p}{\lambda} c(\arcsin \frac{RA}{\varphi R} - \arcsin \frac{RI}{\varphi R}), \quad (2,87)$$

also über $RA = \sqrt{2} R$, $RI = R$ und $\varphi = 8$

$$\sigma_0 < 1.72 .$$

Damit ergibt sich über (2,73) die Abschätzung

$$|P^n - p| \leq \varepsilon_{\max} + 2.0 .$$

Wie oben ist $\varepsilon_{\max}$ der Tabelle IV bzw. Abb.22 zu entnehmen.

Entsprechend zu Tabelle VI bringt Tabelle VII für die Kurve (1) die Abweichung $|P^n - p|$ in Abhängigkeit von h bei Berücksichtigung des Fehlers σ_0 .

Tabelle VII:

h	$ P^n - p $
R	< 2.5
$R/2$	< 2.3
$R/4$	< 2.1

Der Fehler σ_0 wird durch den Übergang vom unbeschränkten Bereich B zum beschränkten B' verursacht.

Er verkleinert sich mit wachsendem φ , also größer werdender Ausdehnung von B'. Soll er ebenfalls die Größe der übrigen Fehleranteile, also ≈ 0.1 haben, ist ein $\varphi = 16$ im Gegensatz zu $\varphi = 8$, wie es der Berechnung zugrunde lag, zu wählen.

Die gemäß (2,75) orientierende Fehlerabschätzung nach RUNGE für den gesamten Bereich B' führt zu folgender Tabelle VIII und Abb.23.

Tabelle VIII:

h	$\text{Max } \varepsilon_{2h}$
R	6.1
$R/2$	2.8
$R/4$	2.3

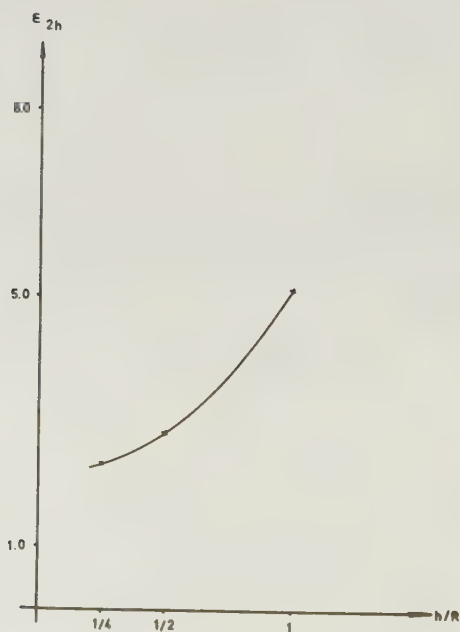


Abb. 23: Abhängigkeit des RUNGESchen Fehlers
 $\text{Max } \varepsilon_{2h}$ von h für das gesamte B' .

Aus Abb. 23 ist abzulesen, daß durch weitere Halbierung von h keine wesentliche Verbesserung des orientierenden Fehlers zu erwarten ist.

Zusammenfassung:

Eine Theorie zur Beschreibung der Ausgleichsvorgänge an der Pt-Elektrode bei der pO_2 -Messung wird entwickelt. Ausgangspunkt sind dafür die mehr phänomenologischen Betrachtungen, wie sie aus der Literatur, insbesondere aus [29], bekannt sind, und im Hauptteil A,I kurz vorgestellt werden. Ihre mathematische Begründung findet die Theorie in den Lösungen bestimmter RW-Probleme im Sinne der ersten RW-Aufgabe für eine lineare, partielle DGl zweiter Ordnung in einem dreidimensionalen Bereich B mit dem Rand $\{C_0, C_\infty\}$, der Diffusionsgleichung. Die einzelnen RW-Probleme und ihre Lösungsmethoden sind in erster Linie durch die Form des Randstückes C_0 , das ist die Pt-Oberfläche der Elektrode, bestimmt. Aus der Literatur bekannte Lösungen der RW-Probleme, insbesondere aus der Theorie der Wärmeleitung, werden übernommen. Das betrifft die Lösungen (2,11), (2,12), (2,13), (2,15) und (2,24). Falls nur die Lösungen ähnlich gelagerter RW-Probleme bekannt sind, werden die genauen Lösungen erbracht. Es sind dies die Formeln (2,31) und (2,42).

Im Gegensatz zu den exakten Lösungsmethoden bei kugel- bzw. zylindersymmetrischer Gestalt von C_0 , ist bei quadratischem C_0 nur eine näherungsweise Lösung des RW-Problems möglich. Die in bekannter Weise über ein analoges Differenzen-RW-Problem

und damit verbundenem Relaxationsprozeß ermittelte Näherungslösung (Anhang A0) wird hinsichtlich ihres Fehlers abgeschätzt. Aus der Literatur dafür bekannte Wege werden besprochen. Hier wird ein etwas anders gearteter Weg eingeschlagen. Weder die Kenntnis der exakten Lösung des RW-Problems noch einer ihrer Ableitungen ist dafür erforderlich. Die zur Fehlerabschätzung benötigte Hilfsfunktion (2,77), ein uneigentliches Integral, gebildet aus den exakten Lösungen zweier RW-Probleme bei abgeänderter Gestalt von C_0 , wie die auf diskreten Punktmengen definierten Näherungslösungen bestimmter Genauigkeitsgrade selbst werden anhand der ALGOL-Programme von Anhang A0 numerisch ermittelt. Lediglich bei der Auswertung des Integrals von Seite 88 wird auf ein bekanntes Programm für das ROMBERG-Verfahren zurückgegriffen. Die im Integranden der Hilfsfunktion enthaltene nullte BESSEL-funktion wird nach TSCHEBYSCHEFF bzw. über die HANKELschen Reihen asymptotisch angenähert. Die Lösungen der RW-Probleme werden im Hauptteil A,II mit Ausnahme von (2,31) graphisch ausgewertet, zum Teil mit Hilfe von Maschinen. Entsprechend dem Ergebnis des Hauptteils B, daß die Lösung des zylindersymmetrischen RW-Problems durch die eines entsprechenden kugelsymmetrischen angenähert werden kann, falls nur der jeweilige Fluß gemäß (1,0) durch C_0 betragsgleich ist, werden im Hauptteil A,II weitere Ergebnisse aus den Lö-

sungen der DGl abgeleitet. Diese Ergebnisse haben mehr praktische Bedeutung und sind unmittelbar mit den Begriffen "Einzugsbereich", "Rühreffekt" und "Einstellzeit" der Pt-Elektrode verknüpft. Sie werden gesondert zusammengefaßt und diskutiert (s. hierzu Hauptteil A, II, 3).

Literaturverzeichnis

- [1] ALBRECHT, J.: Fehlerabschätzung bei Relaxationsverfahren zur num. Auflösg. linearer Gleichungssysteme
Num. Math. 3 (1961), S.188-201
- [2] ALBRECHT, J.: Zur Fehlerabschätzung beim Gesamt- und Einzelschrittverfahren
Zeitschr.f.Angew.Mathematik und Mechanik 43 (1963), S.83-85
- [3] ALLEN, D.N.d.G.: Relaxationsmethoden
McCraw-Hill, New York, London (1955)
- [4] ALLEN, D.N.de G., ROBINS, B.: The Applicat. of Relaxat. Meth. to Satisfy Normalgradient Bondary Conditions Associated with Threedimensional Part. Differential Equation
Quart.J.Mech. and Appl.Math., Vol.15, (1962)43-51
- [5] ALLEN, D.N.de G., SOUTHWELL, R.: Relaxation Methods Applied to Engineering Problems
Phil.Transact. of the Royal Soc. London, Ser.A, Vol.242(1950), p.379-414
- [6] ALTMAN, M.: A gradient Relaxation Method for Linear Algebraic Equations
Bulletin de L'Académie Polinaise des Sciences, Vol.IX, No.9, p.653-657(1961)
- [7] BABUSKA, I., PRAGER, M., VITASEK, E.: Numer.Processes in Differential Equations
J.Wiley & Sons - London, New York, Sidney SNTL - Publishers of Technical Literature, Prague (1966), p.257 ff.
- [8] BATEMAN, H.:Part. Dgl. of Math.Physics
University Press, Cambridge (1952), p. 119/120,135

- [9] BATSCHULET, E.: Über die num. Auflösung von RW-Problemen bei ellipt. part. DGLn.
Zeitschr. f. Angew. Mathematik u. Physik, Bd. III (1952), S. 165-193
- [10] BAUER, L. F., HEIMHOLD, J., SAMELSON, K., SAUER, R.:
Moderne Rechenanlagen
B. G. Teubner Verlagsgesellschaft Stuttgart (1965), S. 74-76
- [11] CARSLAW, H. S., JAEGER, J. C.: A Problem in Conduction of Heat
Proceedings of the Cambridge Society 35 (1939), p. 394-404
- [12] CARSLAW, H., JAEGER, J. C.: Conduction of Heat in Solids
Oxford University Press (1959), 2nd Edition, p. 313, Appendix I, 100
- [13] CLARK, L. C. jr.: Continuous Recording of Blood Oxygen Tensions by Polarography
J. appl. Physiol. 6, p. 190-193 (1953/54)
- [14] COLLATZ, L.: Bemerkung zur Fehlerabschätzung f. das Differenzverf. bei part. DGLn.
Zeitschr. f. Angew. Mathem. u. Mechanik 13, (1933), S. 56-57

COLLATZ, L.: Aufgaben monotoner Art
Arch. Math. 3 (1952), S. 366-376
- [15] COLLATZ, L.: Numer. Behandlung von DGLn
Springer, Berlin-Göttingen-Heidelbg. (1955), S. 325, 337, 332, 354
- [16] COLLATZ, L.: Fehlerabschätzung bei der ersten RW-Aufgabe bei ell. DGLn.
Z. f. A. M. u. M., Bd. 32 (1952), S. 202-211
- [17] COURANT, R.; FRIEDRICHS, K., LEWY, H.: Über die part. Differenzengln. d. mathem. Physik
Math. Annalen 100 (1928), S. 32-74

- [18] COURANT, R., HILBERT, D.: Methods of Mathem. Physics,
Vol.2, (1962), p.255
Interscience Publishers. A Division of
Wiley & Son, New York/London
- [19] CRANK, J.: The Mathematics of Diffusion
Oxford at the Clarendon Press (1957),
p.4, 8
- [20] DOETSCH, G.: Anleitung zum praktischen Gebrauch der
LAPLACE-Transformation
R.Oldenbourg, München (1956),
S. 11/12, 20, 103 f., 111/112
- [21] DOETSCH, G.: Handbuch d. Laplace-Transformation
I, II u. III
Verlag Birkhäuser, Basel (1950), (1955)
u. (1956) (I), S.191 f.
- [22] EMMANS, H.W.: The Numer. Sol. of Part. Differential
Equations
Quart. of Applied Mathematics, Vol.II
(1944), p.173-195
- [23] Enzyklopädie der Mathematischen Wissenschaften Bd.5,1
Abschnitt: Wärmeleitung (1930)
- [24] FELDMANN, H.: Ein hinreichendes Konvergenzkriterium
und eine Fehlerabschätzung für die Itera-
tion in Einzelschritten bei linearen Glei-
chungssystemen
Zeitschr.f.Angew.Math.u.Mech. 41 (1961),
S. 515-516
- [25] FOX, L.: Solution by Relaxation Methods of Plane
Potential Problems with Mixed Boundary
Conditions
Quart. of Applied Mathematics, Vol.II
(1944), p.251-257
- [26] FOX, L.: The Num. Solution of Ellipt. Differential
Equation When the Boundary Conditions
Involve a Derivative
Philos.Transact.Royal Soc.London, Ser.A,
Vol.242 (1950), p.345-378

- [27] FRANK,P., MISES,R.v.: Die DGLn und IGLn d. Mechanik
u. Physik
Fr.Vieweg & Sohn, Braunschweig (1961)
Bd.1, S.734-737
Bd.2, S.530-531
- [28] GERSCGORIN,S.: Fehlerabschätzung für das Differenzenverfahren zur Lösung part. DGLn
Zeitschr.f.Angew. Mathematik u. Mechanik
Bd.10 (1930), S.373-382
- [29] GLEICHMANN,U., LÜBBERS,D.W.: Die Messung des Sauerstoffdruckes in Gasen und Flüssigkeiten mit der Pt-Elektrode unter besonderer Berücksichtigung der Messung im Blut
Pflügers Archiv 271, Heft 4, S.431-455 (1960)
- [30] GRIGULL,U.: Die Grundgesetze der Wärmeübertragung
Springer-Verlag, Berlin/Göttingen/Heidelberg (1955), S.112-115
- [31] HARTREY,D.R., WOMERSLEY,J.R.: A Method for the Numerical Solution of Certain Types of Partial Differential Equations
Proc. of the Royal Society of London, Vol.161 (1937), p.353-366
- [32] HEYROVSKY,J., KUTA,J.: Grundlagen der Polarographie
Akademie-Verlag, Berlin (1965), S.1 ff.
- [33] HOPF,E.: Elementare Bemerkungen über die Lösungen partieller DGLn zweiter Ordnung vom ellipt. Typus
Sitzungsbericht d. Preuß. Akademie d. Wissenschaften, Phys.-Math. Klasse (1927), S. 147-152
- [34] JAHNKE-EMDE-LÖSCH: Tafeln höherer Funktionen
B.G.Teubner Verlagsgesellschaft, Stuttgart (1960), S.17, 146/147

- [35] JOST, W.: Diffusion in Solids, Liquids, Gases
Academic Press Inc., Publishers, New
York (1960), p.298

- [36] KANTOROWITSCH, L.W., KRYLOW, W.I.: Näherungsmethoden
d. höheren Analysis
Deutscher Verlag d. Wissenschaften,
Berlin (1956), S.190 f., 225

- [37] LENSE, J.: Reihenentwicklungen in der mathematischen
Physik
Walter de Gryter & Co., Berlin (1947),
S.112

- [38] LIEBMANN, H.: Die angenäherte Ermittlung harmonischer
Funktionen u. konformer Abbildungen
Sitzungsberichte d. math.-phys. Klasse
d. Bayrischen Akademie d. Wissenschaften
München (1918), S.385-416

- [39] MASOW, W.: On the Truncation Error in the Solution
of LAPLACE's Equation by Finite Diffe-
rences
J. of Research of the National Bureau
of Standards, Vol.48, No.4 (1952),
p.345-348

- [40] MICHELL, A.R., PEARE, R.P.: Explicit Difference Me-
thod for Solving the Cylindrical Heat
Conduction Equation
Math.Comp. (1962), p.426-432

- [41] MISES v., POLLACK-GEIRINGER: Prakt. Verf. d. Glei-
chungsauflösung
Zeitschr.f.Angew.Mathem.u.Mechanik 9
(1929), S.58-77

- [42] MOCHIZUKI, M., BARTELS, H.: Amperometr. Messung des
O₂-Druckes im Vollblut mit d. blanken
Pt-Elektrode
Pflügers Archiv Physiol. 261, S.152-161
(1955)

- [43] MOSKOVITZ, D.: The Num. Solution of LAPLACE's and
POISSON's Equation
Quart. of Appl. Math., Vol.II (1944),
p.148-163
- [44] NEITZERT, W.A.: Schweißen und Heißsiegeln von Kunst-
stoffolien
Die Kunststoffbücherei, Bd.7, S.36
R.Zechner-Verlag GmbH. (1964)
Speyer - Wien - Zürich
- [45] OSTROWSKI, A.: Determinanten mit überwiegender Haupt-
diagonalen und die absolute Konvergenz
von linearen Iterationsprozessen
Commentarii Mathematici Helvetici, Vol.30,
1955, S.175-210
- [46] PANOW, D.J.: Formelsammlung zur numer. Behandlung
partieller Differentialgleichungen nach
dem Differenzenverfahren
Akademie-Verlag, Berlin (1955), S.21/22,
24/25
- [47] PETROWSKI, I.G.: Vorlesungen über part. DGLn
B.G.Teubner Verlagsgesellschaft, Leip-
zig (1955), S.189
- [48] POLOSHI, G.N.: Mathematisches Praktikum
B.G.Teubner Verlagsgesellschaft, Leip-
zig (1963), S.349 f., 373,370
- [49] RICHARDSON, L.F., GAUNT, J.A.: Approach to the Limit
Part I - Single Lattice
Part II - Interpenetrating Lattices
Philos.Transact.Royal Soc.London, Ser.A,
Vol.226 (1926), p.299-349, 350-362
- [50] SCHRÖDER, J.: Fehlerabschätzung bei gewöhnlichen u.
partiellen DGLn
Arch.f.Rat. Mechanics and Analysis,
Vol.2, p.367-392(1958)

- [51] SCHRÖDER, J.: Vom Defekt ausgehende Fehlerabschätzung
bei DGLn
Arch.f.Rat.Mech. and Anal. 3, S.219-228
(1959)
- [52] SHORTLEY, G.H., WELLER, R.: The Numerical Solution of
LAPLACE's Equation
J. of Applied Physics, Vol.9 (1938),
p.334-348
- [53] SOMMERFELD, A.: Partielle DGLn der Physik
Akademie Verlagsgesellschaft Geest &
Portig K.G. (1947), S.33/34
- [54] SOUTHWELL, R.V., VAISEY, G.: Relaxation Methods Applied
to Engineering Problems
Phil.Transact.Royal Soc. London, Ser.A,
Vol. 240 (1948), p.117-161
- [55] STIEFEL, E.: Über einige Methoden der Relaxations-
rechnung
Zeitschr.f.Angew.Math.u.Physik, Bd.III
(1952), S.1-33
- [56] THEWS, G.: Die O_2 -Diffusion in Lungenkapillaren
Bad Oeynhausener Gespräche IV (1960),
S.1-19
- [57] THEWS, G.: Elektrische Analogrechenverfahren zur
Lösung physiologischer Diffusionsprobleme
Pflügers Archiv 276, (1962), S.182/183
- [58] UHLMANN, W.: Über den Fehler bei Mehrstellenverfahren
für die Poissongleichung
Zeitschr.f.Angew.Math.u.Mech. 42 (1962),
S. T46-T49
- [59] WALDSCHMIDT, H.: Numerische Integration nach dem
Romberg-Verfahren
Prozeduren f. ALGOL, Blatt 3 (Aug.1965),
Rechenzentrum d. Techn. Hochschule Darm-
stadt

- [60] WERNER, H.: TSCHEBYSCHJEFF'sche Approximation f.
 BESSELFunktionen
 Bericht Nr.10 der Planungsabteilung
 Kernreaktor Bau- u. Betriebs-Ges.m.b.H.,
 Karlsruhe (1957)
- [61] WOLF, F.: Über eine Methode zur angenähert num.
 Lösung d. zweiten RW-Problems d. har-
 monischen Differentialgleichung
 Zeitschr.f.Angew.Math.u.Mechanik 6
 (1926), S.479-481

A N H A N G

A0 Berechnung des Integrals (2,77) auf S.87.

- - - - -

Berechnung der Näherungslösung P^n in $B' \cap I'$
für $h = R, R/2$ und $R/4$ nach dem Relaxations-
verfahren sowie des RUNGEschen Fehlers.

AO Berechnung des Integrals (2,77) auf S.87

```

ALCOR TR4 (2)  MV 6      MODE 6
'BEGIN'
  'REAL' RA,PI,R,INT,RO,RI,ALFA,A0,A1,A2,A3,A4,A5,A6,A7,A8,A9,
    ALFA1,ALFA2,SUM;
  'INTEGER' H,I,K,J,N,L,RPA,Z,S,S1;
  'BOOLEAN' OK;
  'PROCEDURE' ROMBG1(A,B,N,EPS,PRINT,CHECKN,F) ERGEB:(OK,INT);
    'VALUE' A,B,N,EPS,PRINT,CHECKN;
    'INTEGER' N;
    'REAL' A,B,INT,EPS;
    'BOOLEAN' PRINT,CHECKN,OK;
    'REAL' 'PROCEDURE' F;
    'BEGIN'
      'IF' ('NOT' CHECKN) 'OR' N 'GREATER' 6 'THEN' N:=6;
      'BEGIN'
        'REAL' L,H,SUM,TIALT,TI,D;
        'INTEGER' I,M,Q;
        'ARRAY' T[0:N];
        L:=B-A;
        Q:=2;
        SUM:=(F(A)+F(B))/2;
        TIALT:=SUM*L;
        H:=L/2;
        'FOR' M:=1 'STEP' 1 'UNTIL' N 'DO'
          'BEGIN'
            'FOR' I:=1 'STEP' 2 'UNTIL' Q 'DO'
              SUM:=SUM+F(A+I*H);
              T[M]:=TI:=SUM*H;
              D:=3;
              'FOR' I:=1 'STEP' 1 'UNTIL' M 'DO'
                'BEGIN'
                  TI:=TI+(T)-TIALT)/D;
                  TIALT:=T[I];
                  T[I]:=TI;
                  D:=4*D + 3
                'END';
              'IF' 'NOT' CHECKN 'THEN'
                'BEGIN'
                  'IF' ABS(T[M-1]-TI) 'NOT GREATER' EPS 'THEN'
                    'BEGIN'
                      OK:='TRUE';
                      'GO TO' ENDE
                    'END';
                  'END';
                  TIALT:=[0];
                  Q:=2*Q;
                  H:=L/Q
                'END';
                OK:=ABS(T[N-1]-TI) 'LESS' EPS;
                ENDE:
                INT:=M;
              'END'
            'END';
          'END';
          'REAL' 'PROCEDURE' JO(V); 'VALUE' V; 'REAL' V;
          'BEGIN' 'REAL' Y;
            'IF' V 'EQUAL' 'H' 'THEN'
              JO:=1
            'ELSE'

```

```

*BEGIN*
  *IF 'V' GREATER 'R' THEN*
    JO:=SQRT((2/(PI*V))*((1-9/(128*V*V))+12025/(36864*V*V*V*V))*COS(V-
    0.25*PI)+(1/(8*V)-225/(3072*V*V*V))*SIN(V-0.25*PI))
    *ELSE*
  *BEGIN*
    Y:=(0.125*V)*(0.125*V);
    JO:=A0+Y*(A1+Y*(A2+Y*(A3+Y*(A4+Y*(A5+Y*(A6+Y*(A7+Y*(A8+Y*(A9)))))))
  *END*
*END*
*END*:.
*REAL* *PROCEDURE* F(X); *VALUE* X; *REAL* X;
*BEGIN*
  *IF 'X' EQUAL 'R' THEN*
    F:=(R+R*I)
    *ELSE*
    F:=((SIN(X*RA)+SIN(X*RJ))/X*JO(R*X)*EXP(-Z*X))
  *END*
  *HEAD(N,I,R,R0,RPA,S1)*
*BEGIN*
  *ARRAY* PAF:LI;
*PROCEDURE* LIST(P); *PROCEDURE* P;
*BEGIN*
  *INTEGER* I;
  *FOR* I:=0 *STEP* 1 *UNTIL* 'I' 'DO'
    P(PA[I])
  *END*
*PROCEDURE* FORM;
  *FORMAT* ('(1/.5(8(70.303R),/))');
  PI:=3.14159265;
  A0:=0.999999239; A1:=-15.9999845142; A2:=63.9994811374;
  A3:=-113.771930540; A4:=113.7331096936; A5:=-72.6471474559;
  A6:=31.9635476186; A7:=-9.9794452396; A8:=2.1943978327;
  A9:=-0.231277615;
  RI:=R0; RA:=R0*SQRT(2);
  *FOR* I:=0 *STEP* 1 *UNTIL* 'N' 'DO'
  *FOR* K:=0 *STEP* 1 *UNTIL* 'I' 'DO'
  *BEGIN*
    *FOR* J:=0 *STEP* 1 *UNTIL* 'L' 'DO'
    *BEGIN*
      RI:=SQRT((I*I+K*K)); Z:=J;
      SUM:=0;
      *IF 'R' NOT GREATER 'R0' AND 'J' EQUAL '0' THEN*
        PAF[J]:=0
        *ELSE*
      *BEGIN*
        *IF 'R' NOT GREATER 'RA' AND 'J' EQUAL '0' THEN*
          PAF[J]:=RPA*(0.5-(ARCTAN(RI/SQRT((R+RI)*(R-RI)))/PI)
          *ELSE*
        *BEGIN*
          *IF 'J' EQUAL 'R' THEN*
            PAF[J]:=RPA*(1-(ARCTAN(RI/SQRT((R+RI)*(R-RI)))+ARCTAN(RA/
            /SQRT((R+RA)*(R-RA)))/PI)
          *ELSE*
        *BEGIN*
          *IF 'J' NOT GREATER '2' THEN*
            *FOR* S:=1 *STEP* 1 *UNTIL* (10*S1)'DO'
          *BEGIN*
            ALFA1:=5*(S-1)/(10*S1*J); ALFA2:=5*S/(10*S1*J);
            ROMB1(ALFA1,ALFA2,6,,5,'FALSE','FALSE',F,OK,INT);
            SUM:=SUM+INT

```

```

      'END'
      'ELSE'
      'BEGIN'
      'IF'J'NOTGREATER'7'THEN'
      'FOR'S:=1'STEP'1'UNTIL'(5×S1)'DO'
      'BEGIN'
      ALFA1:=5×(S-1)/(5×S1×J);ALFA2:=5×S/(5×S1×J);
      ROMRG1(ALFA1,ALFA2,6,10-4,'FALSE','FALSE',F,OK,INT);
      SUM:=SUM+INT
      'END'
      'ELSE'
      'FOR'S:=1'STEP'1'UNTIL'(2×S1)'DO'
      'BEGIN'
      ALFA1:=5×(S-1)/(2×S1×J);ALFA2:=5×S/(2×S1×J);
      ROMRG1(ALFA1,ALFA2,6,10-4,'FALSE','FALSE',F,OK,INT);
      SUM:=SUM+INT
'END';
      PAIJJ:=RPAX(1-1/PI×SUM)
      'END'
      'END'
      'END'
      OUTLIST(1,FORM,LIST);
      OUTLIST(4,FORM,LIST)
      'END'
'END'
'END'

```

AN OPERATOR WAS GENERATED. INTERNAL NAME IS 100 100
 TOTAL LENGTH (FULL WORDS) 3180 CODE CORRESPONDING TO SOURCE PROGRAM

ALGOL DATA OPERATOR TR4 MV 1 MODE 1

6 DATA WERE STORED. INTERNAL NAME IS 101 101

OBJECT OPERATOR 100 100 . 14280 FULL WORDS OF WORKING STORAGE ARE

AO Berechnung der Näherungslösung P^n in B''

für $h = R, R/2, R/4$ nach dem Relaxations-
verfahren

sowie des RUNGESchen Fehlers.

ALCOR- ILLINOIS 7090 ALGOL COMPILER

```

'BEGIN'
  'INTEGER' K,J,I,M,L,N,KMAX,JMAX,IMAX,ITERA,H,LE,NE,KI,K1HI,KHI,K1IH,
  KIH,MN,NY,LNY,HNY,NNY,JNY.,
  'REAL' LM,NM,MAXDP,PKJI,PK1HJI,PKHJI,PKJ1IH,PKJ1H,PKJIH,RS,DP,
  EPSDP,INY,KNY,R,DPPA.,
  'PROCEDURE' REWIND(I)., 'INTEGER' I., 'CODE'.,
  READ(NY,N,L,H,R,MN,EPSDP).,
  'BEGIN'
    'ARRAY' P(/1..MN,0..L/),EPS(/0..7/).,
    REWIND(9).,
    FORMAT(9,' 'BLANK'').,
    LNY.=L*NY.,HNY.=H*NY.,NNY.=N*NY.,
    'FOR' I.=0 'STEP' 1 'UNTIL' NNY 'DO'
    'FOR' K.=0 'STEP' 1 'UNTIL' I 'DO'
    'BEGIN'
      'ARRAY' PA(/0..LNY/).,
      READ(PA).,
      INY.=I/NY.,KNY.=K/NY.,
      'IF' ENTIER(INY)'EQUAL' INY 'AND' ENTIER(KNY)'EQUAL' KNY 'THEN'
      'BEGIN'
        KI.=(KNY+1)+0.5*INY*(INY+1).,
        'FOR' J.=0 'STEP' H 'UNTIL' L 'DO'
        'BEGIN'
          JNY.=J*NY.,
          'IF' J'EQUAL' 0 'AND' INY 'NOT GREATER' R 'THEN'
            P(/KI,J/).=0
            'ELSE'
              P(/KI,J/).=PA(/JNY/).,
            'END'
          'END'.,
        PRINTB(PA)
      'END'.,
      LM.=L*0.5+0.1.,LE.=L-H.,NM.=N*0.5+0.1.,NE.=N-H.,ITERA.=0.,
      FORMAT(6,' '4H INY=,F4.0,5H N=L=,F4.0,3H H=,F3.0,3H R=,F4.2,4H MN=,F5.0,
      7H EPSDP=,F7.5//''').,
      PRINTF(NY,N,H,R,MN,EPSDP).,
      WRITE(' 'ITERA  MAXDP  KMAX  JMAX  IMAX  '').,
      SCHLEIFE..ITERA.=ITERA+1.,MAXDP.=0.,
      RS.=0.,
      'FOR' J.=0 'STEP' H 'UNTIL' LM 'STEP' -H 'UNTIL' LM 'DO'
      'FOR' I.=0 'STEP' H 'UNTIL' NM,NE 'STEP' -H 'UNTIL' NM 'DO'
      'FOR' K.=0 'STEP' H 'UNTIL' I 'DO'
      'BEGIN'
        KI.=(K+1)+0.5*I*(I+1).,
        KIH.=(K+1)+0.5*(I+H)*(I+1+H).,
        K1I.=(K+1+H)+0.5*(I+1)*I.,
        'IF' K'NOTEQUAL' 0 'THEN'
        'BEGIN'
          K1HI.=(K+1-H)+0.5*(I+1)*I.,
          PK1HJI.=P(/K1HI,J/)
        'END'.,
        'IF' I'NOTEQUAL' 0 'THEN'
        'BEGIN'
          K1IH.=(K+1)+0.5*(I-H)*(I+1-H).,
          PKJ1IH.=P(/K1IH,J/)
        'END'.,

```

ALCOR- ILLINOIS 7090 ALGOL COMPILER

```

'IF'J'NOTEQUAL'0'THEN'
  PKJ1HI.=P(/KI,J-H/).,
  PKJI.=P(/KI,J/).,
                                PKHJI.=P(/KHI,J/).,
                                PKJHI.=P(/KI,J+H/).,
                                PKJIH.=P(/KIH,J/).,
  'IF'K'EQUAL'I'AND'J'GREATER'0'AND'I'GREATER'0'THEN'
    RS.=PKJ1HI+PKJHI+2*(PK1HJI+PKJIH)-6*PKJI
      'ELSE'
'BEGIN'
'IF'K'GREATER'0'AND'J'GREATER'0'AND'I'GREATER'0'THEN'
  RS.=PK1HJI+PKHJI+PKJ1HI+PKJHI+PKJI1H+PKJIH-6*PKJI
    'ELSE'
  'BEGIN'
'IF'I'GREATER'0'AND'J'GREATER'0'AND'K'EQUAL'0'THEN'
  RS.=PKJ1HI+PKJHI+PKJI1H+PKJIH+2*PKHJI-6*PKJI
    'ELSE'
  'BEGIN'
    'IF'I'GREATER'R'AND'J'EQUAL'0'AND'K'EQUAL'I'THEN'
      RS.=2*(PK1HJI+PKJIH+PKJHI)-6*PKJI
        'ELSE'
  'BEGIN'
    'IF'I'GREATER'R'AND'J'EQUAL'0'AND'K'GREATER'0'THEN'
      RS.=PK1HJI+PKHJI+PKJI1H+PKJIH+2*PKJHI-6*PKJI
        'ELSE'
  'BEGIN'
    'IF'I'EQUAL'0'AND'J'GREATER'0'THEN'
      RS.=PKJ1HI+PKJHI+4*PKJIH-6*PKJI
        'ELSE'
    'IF'I'GREATER'R'THEN'
      RS.=PKJI1H+PKJIH+2*(PKHJI+PKJHI)-6*PKJI
        'END'
  'END'
  'END'
  'END'
  'END'.,
  P(/KI,J/).=PKJI+RS/6.,
  DP.=ABS(RS)/6.,
  'IF'MAXDP'LESS'DP'THEN'
    'BEGIN'
      KMAX.=K.,JMAX.=J.,IMAX.=I.,
      MAXDP.=DP
    'END'
  'END'.,
FORMAT(6,'XF5.0,F11.5,F4.0,2F7.0''),
PRINTF(ITERA,MAXDP,KMAX,JMAX,IMAX).,
'IF'MAXDP'GREATER'EPSDP'THEN'GOTO'SCHLEIFE.,
FORMAT(9,'BLANK''),
REWIND(9).,
'FOR'I.=0'STEP'1'UNTIL'NNY'DO'
'FOR'K.=0'STEP'1'UNTIL'I'DO'
'BEGIN'
  'ARRAY'PA(/0..LNY/).,
  READB(PA).,
  INY.=I/NY.,KNY.=K/NY.,
  'IF'ENTIER(INY)'EQUAL'INY'AND'ENTIER(KNY)'EQUAL'KNY'THEN'

```

ALCOR- ILLINOIS 7090 ALGOL COMPILER

```

'BEGIN'
  KI.=(KNY+1)+0.5*INY*(INY+1).,
  'FOR'J.=0'STEP'H'UNTIL'L'DO'
  'BEGIN'
    JNY.=J*NY.,
    'FOR'M.=0'STEP'1'UNTIL'6'DO'
    'IF'P(/KI,J/)'NOTLESS'60+5*M'THEN'
    'BEGIN'
      DPPA.=ABS(P(/KI,J/)-PA(/JNY/)).,
      'IF'EPS(/M/)'LESS'DPPA'THEN'
      EPS(/M/).=DPPA
    'END'
  'END'
'END'
'END'.,
FORMAT(6,'31H1EPS60 BIS 90 IN SCHRITTEN ZU 5,/(7F8.4)//'').,
PRINTF(EPS).,
FORMAT(6,'20H0 P-FELD FUER H=2*R=,F4.0//'').,
PRINTF(NY).,
WRITE('' BEM..J LAEUFT HORIZONTAL,I,K VERTIKAL,K SCHNELLER ALS I'').
  'FOR'KI.=1'STEP'1'UNTIL'MN'DO'
  'BEGIN'
    'ARRAY'P8H(/0..L/).,
    'FOR'J.=0'STEP'1'UNTIL'L'DO'
    P8H(/J/).=P(/KI,J/).,
    FORMAT(9,'BLANK'').,
    PRINTB(P8H).,
    FORMAT(6,'5F9.3'').,
    PRINTF(P8H)
  'END'
'END'
'END''FINIS'

```

*ID 1113,9,1000 RESULT GRUNEWALD EQ-EL3/4 JOB 1

AD

ALCOR- ILLINOIS 7090 ALGOL COMPILER

```

*BEGIN
  *INTEGER'K,J,I,M,L,N,KMAX,JMAX,IMAX,ITERA,H,LE,NE,KI,K1HI,KHI,K1IH,
    KIH,MN,NY,LNY,HNY,LH,JH,NNY,JNY.,
  *REAL'LM,NM,MAXDP,PKJI,PK1HJI,PKJHI,PKJ1IH,PKJIH,RS,DP,
    EPSDP,INY,KNY,MAXEPS2H,EPS2H,R,DPPA.,
  *PROCEDURE'REWIND(I).,'INTEGER'I.,'CODE'.,
  *PROCEDURE'ENDFIL(I).,'INTEGER'I.,'CODE'.,
    READ(NY,N,L,H,R,MN,LH,EPSDP).,
  *BEGIN
    *ARRAY'P(/1..MN,0..L/),P8H(/0..LH/),EPS(/0..7/).,
    REWIND(9).,
    FORMAT(9,'BLANK').,
    LNY.=L*NY.,HNY.=H*NY.,NNY.=N*NY.,
    *FOR'I.=0'STEP'1'UNTIL'NNY'DO'
    *FOR'K.=0'STEP'1'UNTIL'I'DO'
  *BEGIN
    *ARRAY'PA(/0..LNY/).,
    READB(PA).,
    INY.=I/NY.,KNY.=K/NY.,
    *IF'ENTIER(INY)'EQUAL'INY'AND'ENTIER(KNY)'EQUAL'KNY'THEN'
  *BEGIN
    KI.=(KNY+1)+0.5*INY*(INY+1).,
    *FOR'J.=0'STEP'H'UNTIL'L'DO'
  *BEGIN
    JNY.=J*NY.,
    *IF'J'EQUAL'0'AND'INY'NOTGREATER'R'THEN'
      P(/KI,J/).=0
    *ELSE'
      P(/KI,J/).=PA(/JNY/).,
    *END'
  *END'
  *END'.,
  LM.=L*0.5+0.1.,LE.=L-H.,NM.=N*0.5+0.1.,NE.=N-H.,ITERA.=0.,
  MAXEPS2H.=0.,
  FORMAT(6,'4H1NY=,F4.0,5H N=L=,F4.0,3H H=,F3.0,3H R=,F4.2,4H MN=,F5.0,
    4H LH=,F4.0,7H EPSDP=,F7.5///').,
  PRINTF(NY,N,H,R,MN,LH,EPSDP).,
  WRITE('ITERA  MAXDP  KMAX  .IMAX  IMAX ').,
  SCHLEIFE..ITERA.=ITERA+1.,MAXDP.=0.,
  RS.=0.,
  *FOR'J.=0'STEP'H'UNTIL'LM,LE'STEP'-H'UNTIL'LM'DO'
  *FOR'I.=0'STEP'H'UNTIL'NM,NE'STEP'-H'UNTIL'NM'DO'
  *FOR'K.=0'STEP'H'UNTIL'I'DO'
  *BEGIN
    KI.=(K+1)+0.5*I*(I+1).,
    KIH.=(K+1)+0.5*(I+H)*(I+1+H).,
    KHI.=(K+1+H)+0.5*(I+1)*I.,
    *IF'K'NOTEQUAL'0'THEN'
  *BEGIN
    K1HI.=(K+1-H)+0.5*(I+1)*I.,
    PK1HJI=P(/K1HI,J/)
  *END'.,
  *IF'I'NOTEQUAL'0'THEN'
  *BEGIN
    K1IH.=(K+1)+0.5*(I-H)*(I+1-H).,
    PKJ1IH=P(/K1IH,J/)

```

ALCOR- ILLINOIS 7090 ALGOL COMPILER

```

'END'.,
'IF'J'NOT'EQUAL'0'THEN'
  PKJ1HI.=P(/KI,J-H/).,
  PKJI.=P(/KI,J/).,
                                PKHJI.=P(/KH1,J/).,
                                PKJHI.=P(/KI,J+H/).,
                                PKJIH.=P(/KI1H,J/).,
  'IF'K'EQUAL'I'AND'J'GREATER'0'AND'I'GREATER'0'THEN'
    RS.=PKJ1HI+PKJHI+2*(PK1HJI+PKJIH)-6*PKJI
    'ELSE'
  'BEGIN'
  'IF'K'GREATER'0'AND'J'GREATER'0'AND'I'GREATER'0'THEN'
    RS.=PK1HJI+PKHJI+PKJ1HI+PKJHI+PKJ1IH+PKJIH-6*PKJI
    'ELSE'
  'BEGIN'
  'IF'I'GREATER'0'AND'J'GREATER'0'AND'K'EQUAL'0'THEN'
    RS.=PKJ1HI+PKJHI+PKJ1IH+PKJIH+2*PKHJI-6*PKJI
    'ELSE'
  'BEGIN'
  'IF'I'GREATER'R'AND'J'EQUAL'0'AND'K'EQUAL'I'THEN'
    RS.=2*(PK1HJI+PKJIH+PKJHI)-6*PKJI
    'ELSE'
  'BEGIN'
  'IF'I'GREATER'R'AND'J'EQUAL'0'AND'K'GREATER'0'THEN'
    RS.=PK1HJI+PKHJI+PKJ1IH+PKJIH+2*PKJHI-6*PKJI
    'ELSE'
  'BEGIN'
  'IF'I'EQUAL'0'AND'J'GREATER'0'THEN'
    RS.=PKJ1HI+PKJHI+4*PKJIH-6*PKJI
    'ELSE'
  'IF'I'GREATER'R'THEN'
    RS.=PKJ1IH+PKJIH+2*(PKHJI+PKJHI)-6*PKJI
  'END'
'END'
'END'
'END'
'END'.,
  P(/KI,J/).=PKJI+RS/6.,
  DP.=ABS(RS)/6.,
  'IF'MAXDP'LESS'DP'THEN'
  'BEGIN'
    KMAX.=K.,JMAX.=J.,IMAX.=I.,
    MAXDP.=DP
  'END'
'END'.,
FORMAT(6,'XF5.0,F11.5,F4.0,2F7.0''),
  PRINTF(ITERA,MAXDP,KMAX,JMAX,IMAX).,
  'IF'MAXDP'GREATER'EPSDP'THEN'GOTO'SCHLEIFE.,
  FORMAT(9,'BLANK''),
  REWIND(9).,
'FOR'I.=0'STEP'1'UNTIL'NNY'DO'
'FOR'K.=0'STEP'1'UNTIL'I'DO'
'BEGIN'
  'ARRAY'PA(/0..LNY/).,
  READB(PA).,
  INY.=I/NY.,KNY.=K/NY.,

```

ALCOR- ILLINOIS 7090 ALGOL COMPILER

```

'IF'ENTIER(INY)'EQUAL'INY'AND'ENTIER(KNY)'EQUAL'KNY'THEN'
'BEGIN'
  KI.=(KNY+1)+0.5*INY*(INY+1).,
  'FOR'J.=0'STEP'H'UNTIL'L'DO'
  'BEGIN'
    JNY.=J*NY.,
    'FOR'M.=0'STEP'1'UNTIL'6'DO'
    'IF'P(/KI,J/)'NOTLESS'60+5*M'THEN'
    'BEGIN'
      DPPA.=ABS(P(/KI,J/)-PA(/JNY/)).,
      'IF'EPS(/M/)'LESS'DPPA'THEN'
        EPS(/M/).=DPPA
    'END'
  'END'
'END'
'END'
'END'.,
FORMAT(6,'31H1EPS60 BIS 90 IN SCHRITTEN ZU 5,/(7F8.4)//''),
PRINTF(EPS).,
FORMAT(9,'BLANK'').,
'FOR'I.=0'STEP'2'H'UNTIL'N'DO'
'FOR'K.=0'STEP'2'H'UNTIL'I'DO'
'BEGIN'
  KI.=(K+1)+0.5*I*(I+1).,
  READB(P8H).,
  'FOR'J.=0'STEP'2'H'UNTIL'L'DO'
  'BEGIN'
    JH.=0.5*J.,
    EPS2H.=ABS(P8H(/JH/)-P(/KI,J/))/3.,
    'IF'MAXEPS2H'LESS'EPS2H'THEN'MAXEPS2H.=EPS2H
  'END'
'END'.,
FORMAT(6,'9H0MAXEPS8=,F6.3//'').,
PRINTF(MAXEPS2H).,
FORMAT(6,'20H0 P-FELD FUER H=1*R=,F4.0//'').,
PRINTF(NY).,
WRITE('BEM..J LAEUFT HORIZONTAL,I,K VERTIKAL,K SCHNELLER ALS I').
ENDFIL(9).,
'FOR'KI.=1'STEP'1'UNTIL'MN'DO'
'BEGIN'
  'ARRAY'P4H(/0..L/).,
  'FOR'J.=0'STEP'1'UNTIL'L'DO'
    P4H(/J/).=P(/KI,J/).,
FORMAT(9,'BLANK'').,
PRINTB(P4H).,
FORMAT(6,'8F9.3'').,
PRINTF(P4H)
'END'
'END'
'END'FINIS'

```

*ID 1113,35,2000 RESULT GRUNEWALD EQ-EL3/4 JOB 2 **AD**

ALCOR- ILLINOIS 7090 ALGOL COMPILER

```

'BEGIN'
  'INTEGER'K,J,I,M,L,N,KMAX,JMAX,IMAX,ITERA,H,LE,NE,KI,K1HI,KHI,K1IH,
    KIH,MN,NY,LNY,HNY,LH,JH,NNY,JNY.,
  'REAL'LM,NM,MAXDP,PKJI,PK1HJI,PKJHI,PKJ1IH,PKJ1H,RS,DP,
    EPSDP,INY,KNY,MAXEPS2H,EPS2H,R,DPPA.,
  'PROCEDURE'REWIND(I), 'INTEGER'I., 'CODE'.,
  'PROCEDURE'ENDFIL(I), 'INTEGER'I., 'CODE'.,
  'PROCEDURE'SKPFIL(I,N), 'INTEGER'I,N., 'CODE'.,
    READ(NY,N,L,H,R,MN,LH,EPSDP),
  'BEGIN'
    'ARRAY'P(/1..MN,0..L/),P4H(/0..LH/),EPS(/0..7/),
    REWIND(9),
    FORMAT(9,' 'BLANK''),
    LNY.=L*NY.,HNY.=H*NY.,NNY.=N*NY.,
  'FOR'I.=0'STEP'1'UNTIL'NNY'DO'
  'FOR'K.=0'STEP'1'UNTIL'I'DO'
  'BEGIN'
    'ARRAY'PA(/0..LNY/),
    READB(PA),
    INY.=I/NY.,KNY.=K/NY.,
    'IF'ENTIER(INY)'EQUAL'INY'AND'ENTIER(KNY)'EQUAL'KNY'THEN'
    'BEGIN'
      KI.=(KNY+1)+0.5*INY*(INY+1),
      'FOR'J.=0'STEP'H'UNTIL'L'DO'
      'BEGIN'
        JNY.=J*NY.,
        'IF'J'EQUAL'0'AND'INY'NOTGREATER'R'THEN'
          P(/KI,J/).=0
        'ELSE'
          P(/KI,J/).=PA(/JNY/),
        'END'
      'END'
    'END'.,
    LM.=L*0.5+0.1.,LE.=L-H.,NM.=N*0.5+0.1.,NE.=N-H.,ITERA.=0.,
    MAXEPS2H.=0.,
    FORMAT(6,' '4H1NY=,F4.0,5H N=L=,F4.0,3H H=,F3.0,3H R=,F4.2,4H MN=,F5.0,
      4H LH=,F4.0,7H EPSDP=,F7.5///''),
    PRINTF(NY,N,H,R,MN,LH,EPSDP),
    WRITE(' 'ITERA MAXDP KMAX JMAX IMAX ''),
    SCHLIFE..ITERA.=ITERA+1.,MAXDP.=0.,
    RS.=0.,
    'FOR'J.=0'STEP'H'UNTIL'LM,LE'STEP'-H'UNTIL'LM'DO'
    'FOR'I.=0'STEP'H'UNTIL'NM,NE'STEP'-H'UNTIL'NM'DO'
    'FOR'K.=0'STEP'H'UNTIL'I'DO'
  'BEGIN'
    KI.=(K+1)+0.5*I*(I+1),
    KIH.=(K+1)+0.5*(I+H)*(I+1+H),
    KHI.=(K+1+H)+0.5*(I+1)*I.,
    'IF'K'NOTEQUAL'0'THEN'
  'BEGIN'
    K1HI.=(K+1-H)+0.5*(I+1)*I.,
    PK1HJI.=P(/K1HI,J/)
  'END'.,
  'IF'I'NOTEQUAL'0'THEN'
  'BEGIN'
    K1IH.=(K+1)+0.5*(I-H)*(I+1-H),

```

ALCOR- ILLINOIS 7090 ALGOL COMPILER

```

PKJ1IH.=P(/KI1H,J/)
'END'.,
'IF'J'NOTEQUAL'0'THEN'
PKJ1HI.=P(/KI,J-H/).,
PKJI.=P(/KI,J/).,
PKHJI.=P(/KHI,J/).,
PKJHI.=P(/KI,J+H/).,
PKJIH.=P(/KIH,J/).,
'IF'K'EQUAL'I'AND'J'GREATER'0'AND'I'GREATER'0'THEN'
RS.=PKJ1HI+PKJHI+2*(PK1HJI+PKJIH)-6*PKJI
'ELSE'
'BEGIN'
'IF'K'GREATER'0'AND'J'GREATER'0'AND'I'GREATER'0'THEN'
RS.=PK1HJI+PKHJI+PKJ1HI+PKJHI+PKJ1IH+PKJIH-6*PKJI
'ELSE'
'BEGIN'
'IF'I'GREATER'0'AND'J'GREATER'0'AND'K'EQUAL'0'THEN'
RS.=PKJ1HI+PKJHI+PKJ1IH+PKJIH+2*PKHJI-6*PKJI
'ELSE'
'BEGIN'
'IF'I'GREATER'R'AND'J'EQUAL'0'AND'K'EQUAL'I'THEN'
RS.=2*(PK1HJI+PKJIH+PKJHI)-6*PKJI
'ELSE'
'BEGIN'
'IF'I'GREATER'R'AND'J'EQUAL'0'AND'K'GREATER'0'THEN'
RS.=PK1HJI+PKHJI+PKJ1IH+PKJIH+2*PKJHI-6*PKJI
'ELSE'
'BEGIN'
'IF'I'EQUAL'0'AND'J'GREATER'0'THEN'
RS.=PKJ1HI+PKJHI+4*PKJIH-6*PKJI
'ELSE'
'IF'I'GREATER'R'THEN'
RS.=PKJ1IH+PKJIH+2*(PKHJI+PKJHI)-6*PKJI
'END'
'END'
'END'
'END'
'END'.,
P(/KI,J/).=PKJI+RS/6.,
DP.=ABS(RS)/6.,
'IF'MAXDP'LESS'DP'THEN'
'BEGIN'
KMAX.=K.,JMAX.=J.,IMAX.=I.,
MAXDP.=DP
'END'
'END'.,
FORMAT(6,'XF5.0,F11.5,F4.0,2F7.0'),,
PRINTF(ITERA,MAXDP,KMAX,JMAX,IMAX).,
'IF'MAXDP'GREATER'EPSDP'THEN'GOTO'SCHLEIFE.,
FORMAT(9,'BLANK'),,
REWIND(9).,
'FOR'I.=0'STEP'1'UNTIL'NNY'DO'
'FOR'K.=0'STEP'1'UNTIL'I'DO'
'BEGIN'
'ARRAY'PA(/0..LNY/).,
READB(PA).,

```

ALCOR- ILLINOIS 7090 ALGOL COMPILER

```

INY.=I/NY.,KNY.=K/NY.,
'IF'ENTIER(INY)'EQUAL'INY'AND'ENTIER(KNY)'EQUAL'KNY'THEN'
'BEGIN'
    KI.=(KNY+1)+0.5*INY*(INY+1).,
    'FOR'J.=0'STEP'H'UNTIL'L'DO'
    'BEGIN'
        JNY.=J*NY.,
        'FOR'M.=0'STEP'1'UNTIL'6'DO'
        'IF'P(/KI,J/)'NOTLESS'60+5*M'THEN'
    'BEGIN'
        DPPA.=ABS(P(/KI,J/)-PA(/JNY/)).,
        'IF'EPS(/M/)'LESS'DPPA'THEN'
        EPS(/M/).=DPPA
    'END'
'END'
'END'
'END'.,
FORMAT(6,'31H1EPS60 BIS 90 IN SCHRITTEN ZU 5,/(7F8.4)/(')'.),
PRINTF(EPS).,
FORMAT(9,'BLANK').,
SKPFIL(9,1).,
'FOR'I.=0'STEP'2'H'UNTIL'N'DO'
'FOR'K.=0'STEP'2'H'UNTIL'I'DO'
'BEGIN'
    KI.=(K+1)+0.5*I*(I+1).,
    READB(P4H).,
    'FOR'J.=0'STEP'2'H'UNTIL'L'DO'
    'BEGIN'
        JH.=0.5*J.,
        EPS2H.=ABS(P4H(/JH/)-P(/KI,J/))/3.,
        'IF'MAXEPS2H'LESS'EPS2H'THEN'MAXEPS2H.=EPS2H
    'END'
'END'.,
FORMAT(6,'9H0MAXEPS4=,F6.3/(')'.),
PRINTF(MAXEPS2H).,
FORMAT(6,'22H0 P-FELD FUER H=0.5*R=,F4.0/(')'.),
PRINTF(NY).,
WRITE('8EM..J LAEUFT HORIZONTAL,I,K VERTIKAL,K SCHNELLER ALS I').
ENDFIL(9).,
'FOR'KI.=1'STEP'1'UNTIL'MN'DO'
'BEGIN'
    'ARRAY'P2H(/0..L/).,
    'FOR'J.=0'STEP'1'UNTIL'L'DO'
        P2H(/J/).=P(/KI,J/).,
    FORMAT(9,'BLANK').,
    PRINTB(P2H).,
FORMAT(6,'8F9.3/(')'.),
PRINTF(P2H)
'END'
'END'
'END'FINIS'

```

*ID 1113,360,5000 RESULT GRUNEWALD EQ-EL3/4 JOB 3

AD

ALCOR- ILLINOIS 7090 ALGOL COMPILER

```

'BEGIN'
  'INTEGER' K,J,I,M,L,N,KMAX,JMAX,IMAX,ITERA,H,LE,NE,KI,K1HI,KHI,K1IH,
    KIH,MN,NY,LNY,HNY,LH,JH,NNY,JNY.,
  'REAL' LM,NM,MAXDP,PKJI,PK1HJI,PKHJI,PKJ1HI,PKJHI,PKJ1IH,PKJIH,RS,DP,
    EPSDP,INY,KNY,MAXEPS2H,EPS2H,R,DPPA.,
  'PROCEDURE' REWIND(I), 'INTEGER' I., 'CODE'.,
  'PROCEDURE' SKPFIL(I,N), 'INTEGER' I,N., 'CODE'.,
    READ(NY,N,L,H,R,MN,LH,EPSDP).,
'BEGIN'
  'ARRAY' P(/1..MN,0..L/),P2H(/0..LH/),EPS(/0..7/).,
    REWIND(9).,
    FORMAT(9,' 'BLANK'').,
    LNY.=L*NY.,HNY.=H*NY.,NNY.=N*NY.,
  'FOR' I.=0'STEP'1'UNTIL'NNY'DO'
  'FOR' K.=0'STEP'1'UNTIL'I'DO'
'BEGIN'
  'ARRAY' PA(/0..LNY/).,
    READB(PA).,
    INY.=I/NY.,KNY.=K/NY.,
  'IF' ENTIER(INY)'EQUAL' INY'AND' ENTIER(KNY)'EQUAL' KNY'THEN'
'BEGIN'
  KI.=(KNY+1)+0.5*INY*(INY+1).,
  'FOR' J.=0'STEP'H'UNTIL'L'DO'
'BEGIN'
  JNY.=J*NY.,
  'IF' J'EQUAL'0'AND' INY'NOT GREATER'R'THEN'
    P(/KI,J/).=0
    'ELSE'
    P(/KI,J/).=PA(/JNY/).,
  'END'
'END'
'END'.,
  LM.=L*0.5+0.1.,LE.=L-H.,NM.=N*0.5+0.1.,NE.=N-H.,ITERA.=0.,
  MAXEPS2H.=0.,
FORMAT(6,' '4H1NY=,F4.0,5H N=L=,F4.0,3H H=,F3.0,3H R=,F4.2,4H MN=,F5.0,
4H LH=,F4.0,7H EPSDP=,F7.5///'').,
PRINTF(NY,N,H,R,MN,LH,EPSDP).,
  WRITE(' 'ITERA MAXDP KMAX JMAX IMAX ' ').,
SCHLEIFE..ITERA.=ITERA+1.,MAXDP.=0.,
  RS.=0.,
  'FOR' J.=0'STEP'H'UNTIL'LM,LE'STEP'-H'UNTIL'LM'DO'
  'FOR' I.=0'STEP'H'UNTIL'NM,NE'STEP'-H'UNTIL'NM'DO'
  'FOR' K.=0'STEP'H'UNTIL'I'DO'
'BEGIN'
  KI.=(K+1)+0.5*I*(I+1).,
  KIH.=(K+1)+0.5*(I+H)*(I+1+H).,
  KHI.=(K+1+H)+0.5*(I+1)*I.,
  'IF' K'NOTEQUAL'0'THEN'
'BEGIN'
  K1HI.=(K+1-H)+0.5*(I+1)*I.,
  PK1HJI.=P(/K1HI,J/)
'END'.,
  'IF' I'NOTEQUAL'0'THEN'
'BEGIN'
  K1IH.=(K+1)+0.5*(I-H)*(I+1-H).,
  PKJ1IH.=P(/K1IH,J/)

```

ALCOR- ILLINOIS 7090 ALGOL COMPILER

```

'END'.,
'IF'J'NOTEQUAL'0'THEN'
  PKJ1HI.=P(/KI,J-H/).,
  PKJI.=P(/KI,J/).,
                                PKHJI.=P(/KHI,J/).,
                                PKJHI.=P(/KI,J+H/).,
                                PKJIH.=P(/KIH,J/).,
  'IF'K'EQUAL'I'AND'J'GREATER'0'AND'I'GREATER'0'THEN'
    RS.=PKJ1HI+PKJHI+2*(PK1HJI+PKJIH)-6*PKJI
    'ELSE'
      'BEGIN'
      'IF'K'GREATER'0'AND'J'GREATER'0'AND'I'GREATER'0'THEN'
        RS.=PK1HJI+PKHJI+PKJ1HI+PKJHI+PKJI1H+PKJIH-6*PKJI
        'ELSE'
          'BEGIN'
          'IF'I'GREATER'0'AND'J'GREATER'0'AND'K'EQUAL'0'THEN'
            RS.=PKJ1HI+PKJHI+PKJI1H+PKJIH+2*PKHJI-6*PKJI
            'ELSE'
              'BEGIN'
              'IF'I'GREATER'R'AND'J'EQUAL'0'AND'K'EQUAL'I'THEN'
                RS.=2*(PK1HJI+PKJIH+PKJHI)-6*PKJI
                'ELSE'
                  'BEGIN'
                  'IF'I'GREATER'R'AND'J'EQUAL'0'AND'K'GREATER'0'THEN'
                    RS.=PK1HJI+PKHJI+PKJI1H+PKJIH+2*PKJHI-6*PKJI
                    'ELSE'
                      'BEGIN'
                      'IF'I'EQUAL'0'AND'J'GREATER'0'THEN'
                        RS.=PKJ1HI+PKJHI+4*PKJIH-6*PKJI
                        'ELSE'
                          'IF'I'GREATER'R'THEN'
                            RS.=PKJI1H+PKJIH+2*(PKHJI+PKJHI)-6*PKJI
                            'END'
                          'END'
                          'END'
                          'END'
                          'END'.,
                          P(/KI,J/).=PKJI+RS/6.,
                          DP.=ABS(RS)/6.,
                          'IF'MAXDP'LESS'DP'THEN'
                            'BEGIN'
                              KMAX.=K.,JMAX.=J.,IMAX.=I.,
                              MAXDP.=DP
                            'END'
                          'END'.,
                          'END'.,
                          FORMAT(6,'XF5.0,F11.5,F4.0,2F7.0'').,
                          PRINTF(ITERA,MAXDP,KMAX,JMAX,IMAX).,
                          'IF'MAXDP'GREATER'EPSDP'THEN''GOTO'SCHLEIFE.,
                          FORMAT(9,'BLANK'').,
                          REWIND(9).,
                          'FOR'I.=0'STEP'1'UNTIL'NNY'DO'
                          'FOR'K.=0'STEP'1'UNTIL'I'DO'
                          'BEGIN'
                            'ARRAY'PA(/0..LNY/).,
                            READB(PA).,
                            INY.=I/NY.,KNY.=K/NY.,

```

ALCOR- ILLINOIS 7090 ALGOL COMPILER

```

'IF'ENTIER(INY)'EQUAL'INY'AND'ENTIER(KNY)'EQUAL'KNY'THEN'
'BEGIN'
  KI.=(KNY+1)+0.5*INY*(INY+1).,
  'FOR'J.=0'STEP'H'UNTIL'L'DO'
    'BEGIN'
      JNY.=J*NY.,
      'FOR'M.=0'STEP'1'UNTIL'6'DO'
        'IF'P(/KI,J/)'NOTLESS'60+5*M'THEN'
          'BEGIN'
            DPPA.=ABS(P(/KI,J/)-PA(/JNY/)).,
            'IF'EPS(/M/)'LESS'DPPA'THEN'
              EPS(/M/).=DPPA
          'END'
        'END'
      'END'
    'END'.,
  FORMAT(6,'31H1EPS60 BIS 90 IN SCHRITTEN ZU 5,/(7F8.4)/''),
  PRINTF(EPS).,
  SKPFIL(9,2).,
  FORMAT(9,'BLANK').,
  'FOR'I.=0'STEP'2'H'UNTIL'N'DO'
  'FOR'K.=0'STEP'2'H'UNTIL'I'DO'
    'BEGIN'
      KI.=(K+1)+0.5*I*(I+1).,
      READB(P2H).,
      'FOR'J.=0'STEP'2'H'UNTIL'L'DO'
        'BEGIN'
          JH.=0.5*J.,
          EPS2H.=ABS(P2H(/JH/)-P(/KI,J/))/3.,
          'IF'MAXEPS2H'LESS'EPS2H'THEN'MAXEPS2H.=EPS2H
        'END'
      'END'.,
    FORMAT(6,'9H0MAXEPS2=,F6.3/'),
    PRINTF(MAXEPS2H).,
    FORMAT(6,'23H0 P-FELD FUER H=0.25*R=,F4.0/'),
    PRINTF(NY).,
    WRITE(' BEM..J LAEUFT HORIZONTAL,I,K VERTIKAL,K SCHNELLER ALS I').
    FORMAT(6,'8F9.3').,
    'FOR'KI.=1'STEP'1'UNTIL'MN'DO'
      'BEGIN'
        'ARRAY'PH(/3..L/).,
        'FOR'J.=0'STEP'1'UNTIL'L'DO'
          PH(/J/).=P(/KI,J/).,
        PRINTF(PH)
      'END'
    'END'
  'END''FINIS'

```

Lebenslauf

Am 22.V.1938 wurde ich, Wolfgang, Alfred Grunewald, als Sohn des Behördenangestellten Alfred, Georg Grunewald und seiner Ehefrau Herta, geb. Viertel, in Stollberg/Sa. geboren. Von 1944 bis 1952 besuchte ich die Volksschule zu Meinersdorf/Erzgeb., im Anschluß daran die "Deutsche Oberschule" in Stollberg/Sa. 1955, kurz vor meinem Abitur, verließ ich mit meinen Eltern die DDR. Danach besuchte ich zwei Jahre das Söderblom-Gymnasium in Espelkamp-Mittwald.

Vom WS 1958/59 bis SS 1964 studierte ich Mathematik und Physik. Mein Studienabschluß war das Staatsexamen. Seit 1964 arbeite ich am Institut für Angewandte Physiologie der Universität Marburg. Ich beabsichtige, Physiologe zu werden.

Seit 1965 bin ich verheiratet und wohne in Marburg.

